



---

**Universidad de Valladolid**

Facultad de Ciencias

Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica

TESIS DOCTORAL:

**Aplicaciones de las extensiones  
autoadjuntas de operadores simétricos a  
sistemas físicos con masa variable y  
potenciales singulares**

Presentada por

**Juan José Álvarez Sánchez**

para optar al grado de doctor por la  
Universidad de Valladolid

Dirigida por:

Manuel Gadella Urquiza  
Luis Miguel Nieto Calzada



## Agradecimientos

*Durante los últimos años, y para la confección del presente trabajo, me he beneficiado de la interacción con algunos colegas científicos. Entre ellos destacan mis codirectores de Tesis, Manuel Gadella y Luis Miguel Nieto, en los que he encontrado que la amistad y la Ciencia, si se unen, configuran el mejor entorno de trabajo para desarrollar las capacidades investigadoras de cualquiera que ame la Física. Sin ellos nada de esto habría sido posible.*

*También me gustaría agradecer todo el apoyo que he recibido por parte de mi querido “primo” Luis Pedro Lara, de Félix Maldonado-Villamizar y de F.J.H. Heras, todos ellos coautores de los trabajos que sustentan esta Tesis.*

*Por último, querría agradecer su amistad y su apoyo a Lawrence Glasser, mi compañero de despacho; ha sido un honor tenerle en frente y poder conversar con el paradigma del físico sabio, inteligente y entrañable. También a mis vecinos de pasillo Javier Negro, Şengül Kuru y Mariano Santander, con los que he disfrutado de momentos irrepetibles, así como mis conversaciones con Mariano A. del Olmo y Enrico Celghnini. A todos ellos les debo mucho, como físico y como persona.*



*A mi bata de su valelo ... un pasito va delante del otro.  
A Belén por caminar conmigo y darme su amor.*



# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Fundamentos teóricos</b>	<b>3</b>
1.1. Extensiones Autoadjuntas . . . . .	3
1.1.1. Definición y Dominios . . . . .	3
1.1.2. Clasificación: índices de deficiencia . . . . .	5
1.1.3. Índices de deficiencia: un ejemplo . . . . .	6
1.2. Resonancias . . . . .	10
1.2.1. Definición matemática de resonancia . . . . .	10
1.2.2. Definiciones físicas de las resonancias . . . . .	13
1.2.3. El modelo de Friedrichs . . . . .	15
1.3. Potenciales singulares y sistemas de masa variable . . . . .	18
<b>2. Trabajos originales publicados en esta Tesis Doctoral</b>	<b>23</b>
2.1. Modelos con una barrera impenetrable en el origen . . . . .	23
2.2. Modelos en una dimensión, con una y dos deltas de Dirac y masa variable: resonancias . . . . .	26
2.3. Peine de Dirac no relativista con salto de masa . . . . .	27
<b>3. Otros trabajos derivados de la línea de investigación</b>	<b>31</b>
3.1. Oscilador inestable en una dimensión . . . . .	31
3.1.1. Masa constante y $b = 0$ . . . . .	34
3.1.2. Masa constante y $b \neq 0$ . . . . .	36
3.1.3. Resultados con masa variable . . . . .	37
3.2. Pozo cuadrado infinito con salto de masa: métodos numéricos	39
3.3. Peine de Dirac relativista en una dimensión . . . . .	44
3.3.1. Peine de Dirac relativista con salto de masa . . . . .	48
3.3.2. Peine de Dirac relativista con $N$ masas . . . . .	57
3.3.3. Peine de Dirac relativista y condición de borde: el cris- tal semi-infinito . . . . .	62

*Índice general*

---

<b>4. Conclusiones</b>	<b>67</b>
<b>5. Bibliografía</b>	<b>71</b>
<b>Apéndices y Anexos</b>	<b>75</b>
<b>A. Artículo 1</b>	<b>77</b>
<b>B. Artículo 2</b>	<b>85</b>
<b>C. Artículo 3</b>	<b>95</b>
<b>1. Documento Anexo 1</b>	<b>103</b>
<b>2. Documento Anexo 2</b>	<b>115</b>



# Introducción

En la presente memoria, y siguiendo las especificaciones normativas de la Universidad de Valladolid en lo que se refiere a la presentación de la Tesis Doctoral como compendio de artículos, se presentan tres trabajos [1, 2, 3] indexados en el Journal Citation Reports (JCR).

El presente documento está organizado de la manera siguiente: en el Capítulo 1 se proporcionan una serie de fundamentos teóricos comunes para los tres artículos presentados distribuidos en tres secciones. En la Sección 1.1 se hace hincapié en la definición y los dominios de actuación de los operadores autoadjuntos simétricos y en su clasificación. La definición de las resonancias tanto a nivel matemático como físico es el objeto de la Sección 1.2. El capítulo termina con la Sección 1.3 en la que se ofrece un análisis detallado tanto de la autoadjunción del operador frente a un potencial singular como de las condiciones de empalme o de *matching* de la función de onda, en el caso de salto de masa en el punto donde se aplica el potencial singular.

A continuación, en el Capítulo 2 se presentan los tres artículos en los que se fundamenta esta Tesis [1, 2, 3]. No se pretende repetir los mencionados trabajos sino dar una idea de la estructura y de los resultados que en ellos se presentan. Como quiera que el primero de ellos [1] es la base para los otros dos, la Sección 2.1 es más detallada que las otras dos siguientes.

En el Capítulo 3 se presentan otros tres trabajos derivados de la línea de investigación en extensiones autoadjuntas aplicadas a sistemas con masa variable y potenciales singulares. Las tres secciones que componen este capítulo son más extensas que las del capítulo precedente porque, si bien no se presentan los artículos publicados asociados a estos trabajos [4, 5] (de hecho el trabajo de la Sección 3.3 todavía no se ha publicado), se pretende dar una idea precisa del trabajo desarrollado con posterioridad a la publicación de los artículos que conforman esta Tesis. Para que el lector no tenga que buscar los artículos originales presentados en este capítulo se adjuntan en dos Anexos

## *Introducción*

---

al final del documento.

Unas Conclusiones finales junto con la Bibliografía y los Apéndices donde se incluyen los artículos objeto de esta Tesis Doctoral, y los dos Anexos anteriormente mencionados, completan el documento que conforma la Tesis Doctoral que aquí se presenta.

# Capítulo 1

## Fundamentos teóricos

### 1.1. Extensiones Autoadjuntas

La formulación usual de la Mecánica Cuántica en espacios de Hilbert supone como uno de sus axiomas que los observables están representados mediante operadores autoadjuntos en un espacio de Hilbert. Este espacio de Hilbert puede tener dimensión finita o infinita. En muchos de los casos<sup>1</sup> que se estudian, los espacios son de dimensión infinita y separables. Esto último es equivalente a la existencia de conjuntos ortonormales completos (habitualmente llamados bases ortonormales por los físicos) que son infinitos numerables.

#### 1.1.1. Definición y Dominios

Sea  $A$  un operador en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Por operador vamos a entender una aplicación lineal

$$A : \mathcal{D} \mapsto \mathcal{H}$$

donde  $\mathcal{D}$  es un subespacio de  $\mathcal{H}$ , denso en  $\mathcal{H}$ . Si  $\mathcal{H}$  es de dimensión finita, obviamente  $\mathcal{D} = \mathcal{H}$ , pero en el caso general tenemos infinitos subespacios densos completamente diferentes.  $\mathcal{D}$  es el dominio de  $A$ , el subespacio de  $\mathcal{H}$  sobre el cual actúa. Exigimos que  $\mathcal{D}$  sea denso con el fin de que esté bien definido el operador adjunto de  $A$ ,  $A^\dagger$ . Para las propiedades de  $A^\dagger$  nos remitiremos a la bibliografía usual [6, 7], si bien recordaremos la definición más adelante.

---

<sup>1</sup>Para tratar los problemas usuales en Computación Cuántica, normalmente, se usan espacios de Hilbert de dimensión finita.

Un operador  $A$  es autoadjunto si y solo<sup>2</sup> si  $A = A^\dagger$ , es decir si y solo si coincide con su adjunto.

Habitualmente en Física se denomina a  $A$  como hermítico o autoadjunto si para todos  $\phi, \psi \in \mathcal{H}$  se verifica que

$$\langle \phi | A\psi \rangle = \langle A\phi | \psi \rangle \quad (1.1)$$

donde  $\langle f | g \rangle$  denota el producto escalar de los vectores  $f$  y  $g$ . Sin embargo, esto es solamente cierto si  $A$  es un operador acotado o continuo en  $\mathcal{H}$ . En este caso  $\mathcal{D} = \mathcal{H}$ . Si la dimensión de  $\mathcal{H}$  fuera finita, entonces  $A$  sería siempre un operador acotado. No obstante, excluirémos esta posibilidad a lo largo de nuestra discusión, pues nuestros espacios de Hilbert serán siempre de dimensión infinita y separables.

Si el dominio  $\mathcal{D}$  de  $A$  no fuera todo el espacio  $\mathcal{H}$ , diríamos que  $A$  es hermítico o *simétrico* si y solo si para todos  $\phi, \psi \in \mathcal{D}$  se verifica que

$$\langle \phi | A\psi \rangle = \langle A\phi | \psi \rangle \quad (1.2)$$

Contrariamente a lo que sucede si  $A$  fuera un operador acotado, esta relación no implica que  $A = A^\dagger$ , es decir que  $A$  sea autoadjunto. Vamos a ver lo que esta relación realmente implica.

Sean  $A$  y  $B$  dos operadores con dominios respectivos  $\mathcal{D}_A$  y  $\mathcal{D}_B$ . Diremos que  $B$  extiende a  $A$  y escribiremos  $A \prec B$  si:

- $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{D}_B$
- $\forall \phi \in \mathcal{D}_A, A\phi = B\phi$ .

Repasemos ahora la definición del operador adjunto de  $A$ . Lo primero que haremos será definir el dominio de este adjunto, que denotaremos como  $\mathcal{D}^\dagger$ . Definamos:

$$\mathcal{D}^\dagger := \{ \phi \in \mathcal{H} ; \exists \psi \in \mathcal{H} \text{ con } \langle \psi | \varphi \rangle = \langle \phi | A\varphi \rangle, \forall \varphi \in \mathcal{D} \}. \quad (1.3)$$

En otras palabras, un vector  $\phi$  en  $\mathcal{H}$  pertenece al dominio del adjunto de  $A$  si y solo si existe un vector  $\psi$  tal que la igualdad (1.3) entre productos escalares se verifica para todo  $\varphi$  en el dominio de  $A$ . Entonces definimos el operador adjunto  $A^\dagger$  por su acción sobre todos los vectores de su dominio como  $A^\dagger\phi = \psi$ . De esta manera, la igualdad (1.3) queda como

$$\langle A^\dagger\phi | \varphi \rangle = \langle \phi | A\varphi \rangle$$

---

<sup>2</sup>Generalmente usaremos la nueva regla ortográfica para los acentos. Es bien sabido que según la ortografía anteriormente aceptada, esta palabra debería de llevar acento, es decir debería de haberse escrito *sólo*. De la misma manera omitiremos el acento en palabras como *esto*, etc, aún cuando sean pronombres.

lo cual es totalmente consistente con la pretendida definición de operador adjunto (generaliza el caso acotado) y los operadores están definidos sobre sus dominios.

Se demuestra que  $A^\dagger$  está bien definido sobre su dominio, es decir que  $A^\dagger\phi$  es un único vector para todo  $\phi \in \mathcal{D}^\dagger$  (a través de la densidad de  $\mathcal{D}$ ) y que es lineal. Sin embargo, en general su dominio NO es denso.

Se prueba, sin embargo [6, 7], que si  $A$  es simétrico (o hermítico) automáticamente  $\mathcal{D}^\dagger$  es denso, lo cual incidentalmente implica la existencia del biadjunto  $(A^\dagger)^\dagger$  de  $A$ .

### 1.1.2. Clasificación: índices de deficiencia

De las definiciones anteriores vemos inmediatamente que si  $A$  es simétrico, entonces  $A \prec A^\dagger$ , es decir  $A^\dagger$  extiende a  $A$ . Pero pueden ser operadores diferentes, en el sentido que  $\mathcal{D}$  sea estrictamente más pequeño que  $\mathcal{D}^\dagger$ . Entonces  $A$  no es autoadjunto, ya que no se verificará que  $A = A^\dagger$ , ya que para que dos operadores sean iguales es necesario que los dominios sean iguales y que la acción de los mismos sobre todos los vectores del dominio común sea la misma.

Desde este punto de vista caben las siguientes posibilidades para un operador simétrico o hermítico  $A$  :

1.  $A = A^\dagger$ . Entonces  $A$  es autoadjunto.
2.  $A$  admite una sola extensión autoadjunta. Entonces diremos que  $A$  es *esencialmente autoadjunto*. Un típico ejemplo de esta situación la tenemos con los operadores posición  $Q$  y momento  $P$  en una dimensión cuando su dominio es (en ambos casos) el espacio de Schwartz  $\mathcal{S}(\mathbb{R})$  en una dimensión.
3.  $A$  admite infinitas extensiones autoadjuntas. Estas estarán indexadas por un número de parámetros que puede ser finito o infinito. Como por ejemplo el operador momento  $P = -id/dx$  definido en el espacio de Hilbert  $L^2[a, b]$ , con  $a$  y  $b$  finitos que corresponde al operador momento en el pozo cuadrado infinito. Posteriormente se discutirá este problema con más detenimiento.
4.  $A$  no tiene extensiones autoadjuntas. Sucede por ejemplo con el operador  $P = -id/dx$  en el espacio de Hilbert  $L^2[0, \infty)$ .

De manera natural surge la siguiente pregunta:

¿Cuándo sabemos si un operador simétrico  $A$  está en cualquiera de las situaciones de arriba?

En lo que sigue no vamos a hacer distinción entre operadores autoadjuntos y esencialmente autoadjuntos puesto que, un operador esencialmente autoadjunto define un único operador autoadjunto, y por tanto un único observable cuántico. Además todo operador autoadjunto es obviamente esencialmente autoadjunto.

En cuanto a la distinción entre las posibilidades 2-4 antes expuestas, la forma de discernirlas, es utilizando los llamados *índices de deficiencia* [9]. Vamos a definirlos de la siguiente manera: sean

$$N(A^\dagger \pm iI)$$

los núcleos (subespacios sobre los cuales los operadores van al vector nulo) de los operadores  $A^\dagger \pm iI$ , donde  $I$  es el operador identidad. Llamaremos índices de deficiencia  $n_\pm$  a las dimensiones de estos núcleos:

$$n_\pm := \dim N(A^\dagger \pm iI). \quad (1.4)$$

Entonces tenemos tres posibilidades:

- i)  $n_+ = n_- = 0$ . Entonces  $A$  es esencialmente autoadjunto y recíprocamente, si  $A$  es esencialmente autoadjunto, entonces  $n_+ = n_- = 0$ .
- ii)  $n_+ = n_- \neq 0$ . Esta es la condición necesaria y suficiente para que  $A$  tenga infinitas extensiones autoadjuntas.
- iii)  $n_+ \neq n_-$ . Se verifica si y solamente si  $A$  no tiene extensiones autoadjuntas.

Ahora bien. Si  $A$  tiene infinitas extensiones autoadjuntas, ¿podemos clasificarlas de alguna manera?

### 1.1.3. Índices de deficiencia: un ejemplo

Vamos a exponer un ejemplo muy ilustrativo. Consideremos el operador momento en una dimensión ( $\hbar = 1$ )

$$P = -id/dx \quad \text{en} \quad L^2[a, b]$$

con  $a$  y  $b$  finito. Como en  $L^2[a, b]$  hay funciones que no son diferenciables (los ejemplos son bastante técnicos y los omitimos) o cuyas derivadas no son de cuadrado integrable, entonces tenemos que buscar un dominio para  $P$  que

sea razonable. Escojamos  $C^1[a, b]$ , el espacio vectorial de funciones continuas de  $[a, b]$  en el cuerpo complejo  $\mathbb{C}$  con derivada primera continua (y límites finitos en los extremos del intervalo). Pero, ¿realmente puede ser este espacio vectorial el dominio de un operador simétrico?

Claramente, si  $f(x) \in C^1[a, b]$ , su derivada primera al ser continua es de cuadrado integrable en el intervalo  $[a, b]$ , es decir  $f'(x) \in L^2[a, b]$ . Esta es una condición (casi) mínima para identificar  $C^1[a, b]$  con el dominio de  $P$ . En realidad no es necesario que  $f(x)$  sea derivable en todos sus puntos, puede no serlo en un conjunto de medida de Lebesgue nula.

Una vez supuesto que el dominio de  $P$  es  $C^1[a, b]$ , escribamos a continuación el siguiente producto escalar con  $f(x), g(x) \in C^1[a, b]$ :

$$\begin{aligned} \langle f|Pg \rangle &= -i \int_a^b f^*(x)g'(x) dx = -i\{f^*(b)g(b) - f^*(a)g(a)\} \\ &+ i \int_a^b (f^*)'(x)g(x) dx = -i\{f^*(b)g(b) - f^*(a)g(a)\} + \langle Pf|g \rangle. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Aquí vemos que  $P$ , con dominio  $C^1[a, b]$ , ¡no es ni siquiera hermítico! La condición necesaria y suficiente para que lo sea en general es que para todo par de funciones  $f(x), g(x) \in C^1[a, b]$ , se verifique:

$$f^*(b)g(b) - f^*(a)g(a) = 0, \quad (1.6)$$

o lo que es lo mismo, que para toda función  $f(x) \in C^1[a, b]$ , tengamos que:

$$|f(b)|^2 - |f(a)|^2 = 0. \quad (1.7)$$

Una manera de hacerlo es poner  $f(b) = f(a) = 0$ , pero esto no nos sirve porque estamos buscando un dominio para  $P$  en el cual sea autoadjunto, es decir  $P = P^\dagger$ . La condición  $g(b) = g(a) = 0$  nos dice que  $P$  es simétrico, pues automáticamente se verifica (1.6), con lo que

$$\langle f|Pg \rangle = \langle Pf|g \rangle.$$

Pero entonces notemos que no haría falta poner ninguna restricción sobre el dominio de  $P^\dagger$ . Los dominios serán entonces:

Para  $P$ :

$$\mathcal{D}_P = \{g(x) \in C^1[a, b] \mid g(a) = g(b) = 0\}.$$

Para  $P^\dagger$ :

$$\mathcal{D}^\dagger = C^1[a, b].$$

Ambos dominios son claramente diferentes, por lo que  $P \prec P^\dagger$  estrictamente y por lo tanto  $P \neq P^\dagger$ . Con dominio  $\mathcal{D}_P$ ,  $P$  no es autoadjunto.

Entonces, para que  $P$  sea autoadjunto su dominio ha de coincidir con el de  $P^\dagger$ . Lo que hay que hacer básicamente es aumentar el dominio de  $P$  para que sea menor el dominio de  $P^\dagger$ , de forma que ambos coincidan. La fórmula (1.7) nos sugiere la manera de hacerlo: busquemos las funciones  $f(x) \in \mathcal{D}^\dagger = C^1[a, b]$  para las cuales se verifique (1.7) excluyendo la opción trivial  $f(b) = f(a) = 0$ . Esto nos conduce a

$$f(b) = e^{i\varphi} f(a), \quad (1.8)$$

para todo real  $\varphi$ , o, si nos restringimos a la determinación principal, al menos para todo  $\varphi \in [0, 2\pi)$ . Escogiendo *un*  $\varphi \in [0, 2\pi)$  que verifique (1.8), tendremos un dominio de funciones  $f(x) \in C^1[a, b]$  que verifiquen (1.8). En dicho dominio  $P = P^\dagger$ . Para *otro*  $\varphi \in [0, 2\pi)$ , tendremos otro dominio diferente en el cual  $P = P^\dagger$ , y tendremos así otra extensión autoadjunta de  $P$ .

Notemos que, al ser los dominios de estas extensiones autoadjuntas diferentes, cada extensión autoadjunta define un operador diferente. Así hay tantos operadores autoadjuntos diferentes como números reales en el intervalo  $[0, 2\pi)$ . Todos estos operadores ejercen la misma acción sobre las funciones de su dominio que consiste en multiplicarlos por  $-i$  y luego derivarlas. Pero son realmente operadores diferentes con un espectro diferente por lo cual **no** son *unitariamente equivalentes* (véase [8]).

La conclusión es que hay una infinidad (no numerable) de determinaciones autoadjuntas del operador  $P$  en  $L^2[a, b]$ , indexadas por el parámetro real  $\varphi$ . Es muy natural preguntarse: ¿tiene esto algo que ver con los índices de deficiencia de  $P$  en  $\mathcal{D}_P$ ? Calculémoslos.

En  $\mathcal{D}^\dagger$ ,  $P^\dagger$  actúa como  $-id/dx$ . Para calcular los índices de deficiencia tenemos entonces que resolver el siguiente par de ecuaciones diferenciales:

$$(P^\dagger \pm iI)f(x) = \left(-i\frac{d}{dx} \pm i\right) f(x) = 0, \quad (1.9)$$

cuyas soluciones son:

$$f_-(x) = Ae^x, \quad f_+(x) = Be^{-x}, \quad (1.10)$$

donde  $A$  y  $B$  son constantes arbitrarias y los signos en los subíndices se han puesto para hacerlos coincidir con los de (1.9). Ambas funciones de (1.10) están en el dominio de  $P^\dagger$  y, por lo tanto:

$$n_\pm = \dim N(P^\dagger \pm iI) = 1. \quad (1.11)$$

Vemos que  $n_+ = n_- = 1$  y que, por lo que antes dijimos,  $P$  admitía infinitas extensiones autoadjuntas. Como hemos visto, estas están indexadas por un parámetro real.



Ahora bien, ¿tienen los índices de deficiencia algo que ver con el número de parámetros necesarios para caracterizar todas las extensiones autoadjuntas de un operador simétrico? (por supuesto con índices de deficiencia iguales y distintos de cero). La respuesta está en la teoría de von Neumann de extensiones autoadjuntas de operadores simétricos [9].

Sea  $A$  un operador simétrico con dominio  $\mathcal{D}_A$  denso en un espacio de Hilbert separable  $\mathcal{H}$ . El dominio del adjunto  $A^\dagger$  de  $A$  es

$$\mathcal{D}^\dagger = \mathcal{D}_A \dot{+} N(A^\dagger + iI) \dot{+} N(A^\dagger - iI), \quad (1.12)$$

donde  $\dot{+}$  significa suma directa, no necesariamente ortogonal. Nótese que existen extensiones autoadjuntas si y solamente si  $N(A^\dagger + iI)$  y  $N(A^\dagger - iI)$  tienen la misma dimensión (las cuales coinciden con los índices de deficiencia).

Existe una correspondencia biunívoca entre el conjunto de operadores unitarios  $U$

$$U : N(A^\dagger + iI) \longleftrightarrow N(A^\dagger - iI)$$

y el conjunto de extensiones autoadjuntas de  $A$ . A la única extensión autoadjunta relacionada con el operador unitario  $U$  la llamaremos  $A_U$ . El dominio  $\mathcal{D}_U$  de  $A_U$  es de la forma:

$$\mathcal{D}_U = \{\varphi + \varphi_+ + U\varphi_+ \mid \varphi \in \mathcal{D}_A, \varphi_+ \in N(A^\dagger + iI)\} \quad (1.13)$$

y la acción de  $A_U$  sobre cualquier vector  $\psi \in \mathcal{D}_U$  con  $\psi = \varphi + \varphi_+ + U\varphi_+$  se escribe como:

$$A_U\psi = A\varphi + i\varphi_+ - iU\varphi_+. \quad (1.14)$$

La conclusión es entonces que *el número de parámetros que determinan las extensiones autoadjuntas de  $A$  es justamente el número de parámetros que determinan el conjunto de operadores unitarios entre  $N(A^\dagger + iI)$  y  $N(A^\dagger - iI)$* . Al fijar los valores de estos parámetros, fijamos  $U$  y, por lo tanto,  $A_U$ . Sea  $n = n_+ = n_-$  la dimensión común de los espacios de deficiencia  $N(A^\dagger \pm iI)$ . Entonces, el número de parámetros que determinan las extensiones autoadjuntas de  $A$  son justamente  $n^2 - n = n(n - 1)$ . Así en el caso de  $P$ ,  $n = 1$  y, por lo tanto, tenemos un solo parámetro. En el caso muy común en el que  $n = 2$ , tenemos 4 parámetros. Notemos que estos parámetros son totalmente independientes.

El análisis que acabamos de hacer sobre el operador  $P$  es paradigmático, ya que vamos a fijar las posibles extensiones autoadjuntas de nuestros operadores simétricos usando argumentos de ese tipo.

## 1.2. Resonancias

Uno de los objetivos de la presente Tesis Doctoral es el estudio de algunos sistemas cuánticos que presentan resonancias. Es, por lo tanto, procedente aquí el hacer una breve descripción del concepto de resonancias que vamos a utilizar. Podemos definir las resonancias en Mecánica Cuántica usando criterios más matemáticos o más físicos, incluso teniendo en cuenta que no siempre son equivalentes. Pero todos ellos parten de la existencia de un par de hamiltonianos  $\{H_0, H\}$ , donde  $H_0$  es un hamiltoniano llamado *libre* en un sentido amplio. Como en los estudios relativos a la teoría de perturbaciones, se supone que  $H_0$  es soluble en el sentido de que conocemos, al menos parcialmente, la solución al problema de autovalores para  $H_0$ . La relación entre  $H_0$  y  $H$  está habitualmente fijada por un *potencial*

$$V = H - H_0$$

que nos produce una interacción entre una partícula cuya evolución temporal está gobernada por  $H_0$  y una perturbación externa. Se supone que esta perturbación externa es la que produce el comportamiento resonante.

Ahora bien, ¿qué son las resonancias? Vamos a recordar las definiciones de las mismas que da la literatura.

### 1.2.1. Definición matemática de resonancia

Antes de comenzar con las definiciones primero se deben tener en cuenta las siguientes consideraciones. Sea  $A$  un operador con dominio  $\mathbb{D}$  denso (esto siempre va a ser así, por lo que en adelante omitiremos este comentario) y sea  $\lambda \notin \sigma(A)$ , donde  $\sigma(A)$  es el espectro del operador  $A$ . Como  $\lambda$  no está en el espectro, existe el operador

$$(A - \lambda)^{-1},$$

que llamaremos operador inverso de  $A - \lambda\mathbb{I}$  o bien

$$\frac{1}{A - \lambda}$$

y donde  $\mathbb{I}$  es el operador identidad, que omitiremos en lo sucesivo, al menos cuando sea obvia su presencia. Lógicamente  $(A - \lambda)^{-1}$  es un operador continuo para todo  $\lambda \notin \sigma(A)$ , que llamaremos el *resolvente* de  $A$ . Si  $A$  fuera un hamiltoniano de los que aquí vamos a considerar, sería habitual que su espectro fuera el semieje real positivo  $\mathbb{R}^+ \equiv [0, \infty)$ .

Una vez aclarado este extremo y, teniendo en cuenta que las definiciones matemáticas de resonancias presentadas no siempre son equivalentes, la primera quedaría, según aparece en el clásico de la Física Matemática [10]:

**Definición 1.-** Sea  $\{H_0, H\}$  un par hamiltoniano. Supongamos que existe un subespacio denso de vectores  $\mathcal{D}$  tal que para todo  $\psi \in \mathcal{D}$  se verifica que las funciones de  $\lambda$  definidas como

$$R_{0\psi}(\lambda) = \langle \psi | (H_0 - \lambda)^{-1} \psi \rangle, \quad R_\psi(\lambda) = \langle \psi | (H - \lambda)^{-1} \psi \rangle, \quad (1.15)$$

tienen una prolongación analítica a través del semieje real positivo (que supondremos coincidente con el espectro absolutamente continuo tanto de  $H_0$  como de  $H$ ). Supongamos que  $R_{0\psi}(\lambda)$  es analítica en el punto

$$z_R = E_R - i\frac{\Gamma}{2} \in \mathbb{C}$$

para todo vector  $\psi \in \mathcal{D}$ , pero que sin embargo existe un  $\psi \in \mathcal{D}$  para el cual  $R_\psi(\lambda)$  tiene un polo en  $z_R$ . Entonces diremos que  $z_R$  es una resonancia del par  $\{H_0, H\}$ .

Observación: es importante hacer notar que si  $z_R$  es un polo, también lo va a ser su complejo conjugado. De esta manera, los polos resonantes aparecen en pares. La resonancia está caracterizada por el par de polos.

Para presentar la segunda definición recordemos brevemente lo que es el operador de scattering  $S$ . Antes necesitamos una imagen física de lo que es el scattering. Supongamos que un estado cuántico es creado en el remoto pasado y que evoluciona con  $H_0$ . Designaremos este estado como  $\psi^{in}(t)$ . Si no hubiera perturbación alguna, este estado evolucionaría siempre bajo  $H_0$  y en  $t = 0$  sería  $\psi^{in} = \psi^{in}(0)$ . Supongamos ahora que en una cierta región, este estado se encuentra con una interacción dada por un potencial  $V$ , de tal manera que el hamiltoniano ahora es  $H = H_0 + V$ . Entonces en dicha región este estado evolucionaría de acuerdo con  $H$ . Al salir de la región de interacción, el estado resultante ya no sería  $\psi^{in}(t)$  sino otro que llamaremos  $\psi^{out}(t)$ .

El operador  $S$  de scattering es el que relaciona el estado saliente con el entrante y se le puede definir como:

$$\psi^{out} = S\psi^{in}, \quad \text{siendo} \quad \psi^{out} := \psi^{out}(0). \quad (1.16)$$

No entraremos a discutir aquí las propiedades de  $S$  ni su relación con los (no siempre existentes) operadores de Møller, ni tampoco conceptos como el de completitud asintótica, que se discuten en la literatura especializada

[11, 12, 13, 14]. Hemos usado una imagen idealizada del potencial, al que se le supone restringido a una región del espacio, es decir que  $V(x)$  sería de soporte compacto en representación de configuración. El concepto de operador  $S$  va más allá de este tipo particular de hamiltonianos, pero los usaremos así en nuestras descripciones cualitativas por ser suficiente para el caso que nos ocupa.

Al operador  $S$  se la llama muchas veces *matriz*  $S$ , en particular cuando se usa una representación particular, como la representación de momentos y la de energías.

Supongamos que trabajamos en la representación de momentos o de la de energías. En ambos casos,  $S$  será una función de  $k$  o de  $E$  respectivamente. Si suponemos que el espectro continuo de los hamiltonianos es  $\mathbb{R}^+$ , lo cual haremos siempre (el espectro de un hamiltoniano tiene que ser semiacotado, también lo supondremos no degenerado, lo cual sucede por ejemplo si  $V$  es esféricamente simétrico y tomamos  $\ell = 0$ ), en representación de momentos, (1.16) se escribe como:

$$\psi^{out}(k) = S(k)\psi^{in}(k). \quad (1.17)$$

En principio,  $k \in [0, \infty)$ . Pero admitiendo unas simples relaciones de causalidad (fundamentalmente que el estado saliente no puede ser observado antes de que la partícula haya llegado a la región de interacción [15]), entonces  $S(k)$  admite una prolongación analítica a una función meromorfa en todo el plano complejo. Esta función meromorfa, que seguiremos denotando como  $S(k)$  puede tener las siguientes singularidades [15, 11]:

- i) Polos simples en el semieje imaginario positivo. Corresponden a estados ligados.
- ii) Polos simples en el semieje imaginario negativo. Corresponden a los llamados *estados virtuales* o *antibound states*.
- iii) Pares de polos situados en el semiplano inferior abierto (no hay singularidades en el eje real). Estos están situados simétricamente en relación con el eje imaginario, es decir, si uno es  $k_n$ , el otro es  $-k_n^*$ .
- iv) A veces hay cortes (*branch cuts*) en la prolongación analítica de  $S(k)$ . Por ejemplo cuando  $V$  es el potencial de Yukawa [15].

Podemos ahora dar una definición alternativa de resonancia.

**Definición 2.-** Las resonancias en la formulación de la matriz  $S(k)$  corresponden a los pares de polos descritos en el apartado iii).

Podemos utilizar la representación de energía, teniendo en cuenta que  $k = \sqrt{2mE}$ , de forma que la función  $S(E)$  tendrá una estructura analítica algo diferente, pues existe la prolongación analítica a través del semieje real positivo. Aquí puede ser útil hacer la descripción de dicha prolongación, desde el punto de vista de que es soportada por la superficie de Riemann de dos hojas relacionada con la raíz cuadrada,  $k = \sqrt{2mE}$ . Desde este punto de vista:

1. Los estados ligados se corresponden con polos simples de  $S(E)$  en el semieje real negativo de la primera hoja de la superficie de Riemann.
2. Los estados virtuales o *antibound* están relacionados con polos simples situados en el semieje real negativo en la segunda hoja de Riemann.
3. Las resonancias se corresponden con pares de polos de  $S(E)$  en la segunda hoja de Riemann. Estos polos son complejo conjugados el uno del otro. Si uno de ellos está en el punto  $z_R = E_R - i\Gamma/2$  el otro está en  $z_R^* = E_R + i\Gamma/2$ . Aquí usamos  $\Gamma > 0$  y además se verifica que  $E_R > 0$  [13, 11]. Los dos polos complejo conjugados en la segunda hoja (que llamaremos polos resonantes) representan una única resonancia. Estos polos pueden ser simples o múltiples y tienen exactamente la misma multiplicidad que los polos de  $S(k)$  representando la misma resonancia [16].

Podría haber cortes en  $S(E)$ , pero lo que no puede haber son singularidades esenciales.

En realidad, lo que de verdad importa aquí es la prolongación analítica de  $S(E)$  y su comportamiento. La superficie de Riemann es un mero soporte de la prolongación analítica, es irrelevante y se usa para ilustrar mejor lo que sucede con dicha prolongación analítica.

### 1.2.2. Definiciones físicas de las resonancias

Al definir matemáticamente las resonancias como polos de la matriz  $S$ , hemos supuesto que el potencial está localizado en una región del espacio, hipótesis que vamos a seguir utilizando por conveniencia, pues es muy ilustrativa. A estos potenciales se les suele llamar *cut off potentials* [15].

Ahora bien, ¿qué sería desde un punto de vista físico una resonancia? Si admitimos la imagen descrita recientemente, una resonancia correspondería a una situación en la cual la partícula incidente permanecería un *tiempo largo en la región de interacción en comparación con el que hubiera estado sin la presencia de la misma*. La diferencia entre el tiempo que la partícula hubiera

necesitado para cruzar esta región con o sin interacción es lo que se llama *tiempo de retardo* (*delay time*). Este tiempo de retardo se puede, en principio, calcular [11]. A esta situación (grandes tiempos de retardo en una experimento de scattering) lo llamaremos *scattering resonante*. Desde el punto de vista del scattering resonante, se han propuesto diferentes definiciones de resonancia. No siempre son equivalentes, pero hay algunas condiciones suficientes de su equivalencia [11]. Las más importantes de estas definiciones son:

- i) Las resonancias se corresponden a situaciones en las cuales hay grandes tiempos de retardo. Se comprende intuitivamente bien esta idea, pues entonces la partícula queda atrapada en la región de interacción durante un tiempo y luego consigue escapar.
- ii) La sección eficaz está definida para los procesos experimentales de scattering. Entonces las resonancias aparecen como un pico en la sección eficaz alrededor de un valor de la energía  $E_R$ . El pico tiene una anchura  $\Gamma$ . En las descripciones de las resonancias en términos del resolvente o de  $S(E)$ , las resonancias estaban ligadas con polos en  $z_R = E_R - i\Gamma/2$ . Entonces, la parte real de estos polos se correspondería con la energía resonante y la parte imaginaria con la anchura de del mencionado pico. Notemos que la vida media es  $\tau = 1/\Gamma$  [11].
- iii) Si el potencial es esféricamente simétrico, podemos estudiar separadamente la situación para cada valor del momento angular orbital  $\ell = 0, 1, 2, \dots$ . En términos de los corrimientos de fase (*phase shifts*), una resonancia aparece cuando existe un súbito cambio en uno de ellos,  $\delta_\ell(E)$ , alrededor de la energía resonante  $E_R$  [11].
- iv) La amplitud de scattering  $\psi(E)$  tiene una forma lorenziana del tipo siguiente:

$$|\psi(E)|^2 \approx N \frac{\Gamma}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (1.18)$$

En realidad, la amplitud de scattering  $\psi(E)$  no es otra cosa que la función de ondas describiendo un estado resonante, en la representación de energías. En realidad la fórmula (1.18) es tan solo aproximada pues siempre hay un término adicional de *ruido*, llamado el *background*. Nótese además que la transformada de Fourier de la lorenziana es una exponencial decreciente. Esto implicaría que un estado con la amplitud dada por (1.18) decaería exponencialmente de manera exacta para todo  $t > 0$ , lo cual sabemos que no puede ser cierto [17].

### 1.2.3. El modelo de Friedrichs

A modo de ejemplo, vamos a discutir aquí el modelo de Friedrichs, que es un modelo exactamente soluble en el que aparecen resonancias que exhiben todas las propiedades que hemos discutido. El modelo de Friedrichs más básico tiene tan solo una resonancia, con lo que se simplifica enormemente. Además ofrece un contraste interesante con los modelos estudiados en esta Tesis, modelos que tienen un número infinito de resonancias y que, si bien son solubles, sus soluciones son tales que no se pueden calcular analíticamente, sino a través de métodos numéricos. Por este motivo, estos modelos son denominados *cuasi solubles*.

En el modelo de Friedrichs tenemos un par de hamiltonianos  $\{H_0, H\}$ , donde  $H_0$  es el hamiltoniano no perturbado y

$$H = H_0 + \lambda V$$

y donde  $\lambda$  es una constante de acoplamiento. En nuestro caso se supone que,  $H_0$  tiene un espectro absolutamente continuo que coincide con el semieje real positivo  $\mathbb{R}^+$  y un autovalor  $\omega_0 > 0$ . Es decir, el autovalor está sumergido en el espectro continuo. De esta manera,  $H_0$  admite una descomposición espectral (o equivalentemente puede ser *diagonalizado*) en la forma:

$$H_0 = \omega_0 |1\rangle\langle 1| + \int_0^\infty \omega |\omega\rangle\langle \omega| d\omega. \quad (1.19)$$

Aquí  $|1\rangle$  es el autovector (normalizado) de  $H_0$  con autovalor  $\omega_0$  y  $|\omega\rangle$  es el autovector de  $H_0$  con autovalor  $\omega \in [0, \infty)$  que no puede ser un elemento del espacio de Hilbert, sino un funcional [18]. Así:

$$H_0|1\rangle = \omega_0|1\rangle, \quad H_0|\omega\rangle = \omega|\omega\rangle, \quad \forall \omega \in \mathbb{R}^+. \quad (1.20)$$

En cuanto al potencial  $V$  mezcla el espectro discreto y el continuo de  $H_0$ :

$$V = \int_0^\infty f(\omega) [|\omega\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle \omega|] d\omega. \quad (1.21)$$

La función  $f(\omega)$  se suele tomar de cuadrado integrable y se llama *factor de forma*.

Como consecuencia de lo anterior  $H$  tiene un espectro absolutamente continuo y no degenerado que coincide con el semieje real  $\mathbb{R}^+ \equiv [0, \infty)$  [19]. Resulta que el autovalor  $\omega_0$  de  $H_0$  se transformó en una resonancia. Para demostrar esto veamos que el modelo tiene una resonancia (y solo una). Usemos el método del resolvente para demostrarlo. No vamos a comentar

aquí todos los detalles, pero lo que se hace es considerar el siguiente resolvente reducido del hamiltoniano total:

$$\frac{1}{\eta(z)} := \langle 1 | \frac{1}{H - z} | 1 \rangle. \quad (1.22)$$

Resulta que la misma expresión con  $H_0$  en lugar de  $H$  y cualquier otro vector en lugar de  $|1\rangle$  es analítica en  $z$ . Esto también es cierto si mantenemos  $H$ , pero cambiamos el vector, por lo que si hay resonancias estas tienen que provenir de los polos de (1.22), o equivalentemente, de los ceros de  $\eta(z)$ . La forma explícita de esta función es:

$$\eta(z) = z - \omega_0 - \lambda^2 \int_0^\infty \frac{|f(\omega)|^2}{z - \omega} d\omega. \quad (1.23)$$

Bajo ciertas condiciones impuestas al factor de forma  $f(\omega)$ , la función admite una prolongación analítica a todo el plano complejo con un punto de ramificación en el origen y un corte que coincide con el semieje positivo, es decir, con el espectro continuo de ambos  $H_0$  y  $H$ . Esta función no admite otras singularidades en el plano complejo. Sin embargo, sí que admite una prolongación analítica a través del corte, en ambas direcciones de arriba a abajo y de abajo a arriba. Esta prolongación analítica tiene dos polos simples en los puntos  $z_R$  y  $z_R^*$ , los cuales están dados por:

$$z_R = \omega_0 + \lambda^2 \int_0^\infty \frac{|f(\omega)|^2 d\omega}{z_R - \omega + i0} = \omega_0 + \lambda^2 \int_0^\infty \frac{|f(\omega)|^2 d\omega}{\omega_0 - \omega + i0} + o(\lambda^4),$$

$$z_R^* = \omega_0 + \lambda^2 \int_0^\infty \frac{|f(\omega)|^2 d\omega}{z_R - \omega - i0} = \omega_0 + \lambda^2 \int_0^\infty \frac{|f(\omega)|^2 d\omega}{\omega_0 - \omega - i0} + o(\lambda^4).$$

Observemos que cuando  $\lambda \mapsto 0$ , entonces  $z_R, z_R^* \mapsto 0$ . Esto es una importante condición de consistencia, ya que implica que si quitamos la interacción, poniendo  $\lambda = 0$ , volvemos a la situación inicial. Nótese la analiticidad del polo resonante  $z_R$  con respecto al factor de forma  $f(\omega)$  [20].

El hamiltoniano total tiene dos series de autovectores generalizados para cada  $\omega \in [0, \infty)$ . Estas dos series se corresponden con las prolongaciones analíticas de arriba a abajo de la prolongación analítica de  $\eta(z)$  a través del corte y viceversa. Estas prolongaciones analíticas (en realidad es la misma) están determinadas por los valores de frontera de  $\eta(z)$  en el eje real tomando límites por arriba y por abajo (estos límites son necesariamente distintos porque estamos en el corte de una función analítica), a los cuales llamaremos respectivamente  $\eta_+(\omega)$  y  $\eta_-(\omega)$ . Llamaremos a estos autovectores generalizados  $|\omega^\pm\rangle$  con  $H|\omega^\pm\rangle = \omega|\omega^\pm\rangle$ . Estos tienen la forma:

$$|\omega^\pm\rangle = |\omega\rangle + \frac{\lambda f(\omega)}{\eta_\pm(\omega)} \left( |1\rangle + \int_0^\infty \frac{\lambda f(\omega')}{\omega - \omega' \pm i0} |\omega'\rangle d\omega' \right). \quad (1.24)$$



El  $\pm i0$  que aparece en el denominador de (1.24) tiene el significado habitual en teoría de distribuciones [21] y, por consiguiente, las fórmulas de Plemelj tienen vigencia aquí.

El hamiltoniano total  $H$  admite la siguiente descomposición con respecto a  $|\omega^\pm\rangle$ :

$$H = \int_0^\infty \omega |\omega^\pm\rangle \langle \omega^\pm| d\omega. \quad (1.25)$$

Definamos ahora el vector decreciente de Gamow,  $|\psi^D\rangle$ , como la parte que decae exponencialmente para  $t < 0$  de un estado resonante. Esto representa una buena aproximación para valores del tiempo que no son ni muy pequeños ni muy grandes. Junto al vector decreciente de Gamow, existe un vector creciente  $|\psi^G\rangle$  con  $t > 0$ , que en realidad es la *inversión temporal* del anterior. Estos vectores de Gamow son asimismo autovectores del hamiltoniano total  $H$  con autovalores  $z_R$  y  $z_R^*$  respectivamente [22, 23]:

$$|\psi^D\rangle = |1\rangle + \int_0^\infty \frac{\lambda f(\omega)}{z_R - \omega + i0} |\omega\rangle d\omega, \quad (1.26)$$

$$|\psi^G\rangle = |1\rangle + \int_0^\infty \frac{\lambda f(\omega)}{z_R^* - \omega - i0} |\omega\rangle d\omega, \quad (1.27)$$

con la propiedad:

$$H|\psi^D\rangle = z_R|\psi^D\rangle, \quad H|\psi^G\rangle = z_R^*|\psi^G\rangle. \quad (1.28)$$

Los vectores de Gamow no son normalizables (el hamiltoniano en el espacio de Hilbert es autoadjunto), sino funcionales en un espacio mayor que el espacio de Hilbert usual. Tienen sentido en los duales de espacios de Hilbert equipados (en general diferentes para cada vector de Gamow), también llamados tripletas de Gamow [18, 22, 23].

Con respecto a los vectores de Gamow, el hamiltoniano total admite las siguientes descomposiciones espectrales:

$$H = z_R|\psi^D\rangle \langle \psi^G| + \text{background}, \quad (1.29)$$

$$H = z_R^*|\psi^G\rangle \langle \psi^D| + \text{background}. \quad (1.30)$$

La forma explícita del background está bien definida y no nos interesa aquí. Lo importante es la parte de la descomposición espectral relativa a la parte del Gamow. En realidad estas dos descomposiciones corresponden a dos extensiones diferentes del hamiltoniano a dos duales en dos tripletas de Gamow [24, 25].

Finalmente, pondremos de relieve que el modelo de Friedrichs tiene todos los ingredientes del formalismo de scattering resonante. En particular, la matriz  $S$  en representación de energías es una función  $S(\omega)$  en el semieje positivo relativamente simple [26]:

$$S(\omega) = 1 + \frac{2\pi i \lambda^2 |f(\omega)|^2}{\eta_+(\omega)}. \quad (1.31)$$

El modelo de Friedrichs tiene prácticamente todos los ingredientes que le hacen valer como modelo en la descripción de las resonancias en Mecánica Cuántica no relativista, como quedó dicho al principio. Este modelo admite multitud de variantes y generalizaciones que lo hacen muy útil. Para un review de muchas de ellas (pero no todas), véase [27].

### 1.3. Potenciales singulares y sistemas de masa variable

En los últimos años el estudio de hamiltonianos con potenciales singulares [28, 29, 30, 31] y el desarrollo de modelos de sistemas con masa variable [32, 33, 34] están atrayendo una gran atención por la comunidad científica. El caso más simple es aquel en el que la masa es constante excepto en un punto, en el cual se produce una discontinuidad, o salto de la recta real. Este tipo de discontinuidad abrupta es muy interesante, desde el punto de vista de la física, ya que puede utilizarse para representar uniones abruptas de materiales heterogéneos [32].

El hamiltoniano, en estos casos de masa variable, puede descomponerse en dos términos: un hamiltoniano no perturbado  $H_0$ , que es puramente cinético, más un potencial singular. La forma general del hamiltoniano no perturbado es:

$$H_0 = \frac{1}{2} m^\alpha(x) P m^\beta(x) P m^\alpha(x), \quad (1.32)$$

con la condición  $2\alpha + \beta = -1$  y siendo  $m(x)$  una función que nos proporciona la masa como función de la posición. Consecuentemente  $m(x)$  deberá representarse como un operador que, en general, no conmutará con el operador momento  $P$  ya que es una función de la variable  $x$ .

El caso más sencillo de estudiar es el de un potencial delta de Dirac situado en el mismo punto donde se produce la discontinuidad de masa. La idea central de este sistema, que ya ha sido introducido en [1], es combinar la discontinuidad de masa y el potencial delta de Dirac. La manera más natural

de introducir la discontinuidad de masa en  $x = a$ , con  $a > 0$ , es:

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & \text{si } x < a, \\ m_2 & \text{si } x > a. \end{cases} \quad (1.33)$$

La arbitrariedad en la definición de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  se suele resolver eligiendo aquellos parámetros que permiten que  $H_0$  sea invariante galileano [33], esto es  $\alpha = 0$  y  $\beta = -1$ . En [1] se ha demostrado que el dominio de autoadjunción de  $H_0$  está definido por el conjunto de las funciones de cuadrado integrable  $\psi(x)$  y que son continuas en el punto de discontinuidad junto con la condición de empalme:

$$\frac{1}{m_2} \psi'(a+) - \frac{1}{m_1} \psi'(a-) = 0, \quad (1.34)$$

donde  $f(a\pm)$  representa los límites laterales

$$\lim_{x \rightarrow a\pm} f(x) = f(a\pm),$$

con lo que el término cinético  $H_0$  queda de la siguiente forma [1]

$$H_0 := \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx^2}, & x < a, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx^2}, & x > a, \end{cases} \quad (1.35)$$

y el hamiltoniano total

$$H = H_0 + \gamma\delta(x - a), \quad a > 0. \quad (1.36)$$

Lógicamente, debemos tener bien definido el hamiltoniano total (1.36) al igual que ya se hizo en [35], para lo cual utilizaremos el formalismo de von Neumann para extensiones autoadjuntas de operadores simétricos con iguales índices de deficiencia [28, 29].

Lo primero será determinar el dominio  $\mathcal{D}(H)$  para  $H$ . Este dominio estará constituido por un subespacio del espacio de las funciones de cuadrado integrable, contenidas en el espacio de Sobolev  $W(\mathbb{R}/\{0\})$  que habrán de cumplir ciertas condiciones:

- (i) Cualquier  $\varphi(x) \in W(\mathbb{R}/\{0\})$ , ha de admitir una primera derivada continua en todo  $\mathbb{R}$  (excepto en el origen).
- (ii) La segunda derivada existe casi en cualquier sitio.

(iii) Tanto  $\varphi(x) \in W(\mathbb{R}/\{0\})$  como su segunda derivada cumplen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \{\varphi(x)^2 + |\varphi''(x)|^2\} dx < \infty.$$

Además deberán satisfacerse las condiciones de empalme en el punto de la discontinuidad de masa  $x = a$ , que se pueden escribir de la siguiente forma [1]:

$$\begin{pmatrix} \varphi(a+) \\ \varphi'(a+) \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} \varphi(a-) \\ \varphi'(a-) \end{pmatrix}, \quad (1.37)$$

La matriz  $\mathcal{T}$  de dimensión  $2 \times 2$  proporciona las condiciones de empalme de la función de onda en  $x = a$  y las primas denotan derivada con respecto a  $x$ .

Los dominios de  $H$  y  $H^\dagger$  son los mismos que cuando no tenemos salto de masa así que el problema lo tenemos en  $x = a$ . Escribiendo el salto de masa en  $x = a$  de la siguiente forma

$$\frac{1}{m(x)} = \frac{1}{m_1} \Delta(a - x) + \frac{1}{m_2} H(x - a),$$

donde  $\Delta(a - x)$  es la función característica del intervalo  $[0, a]$  (vale uno en el intervalo y cero fuera de él) y  $H(x - a)$  la función de Heaviside y, aplicando el término cinético a una función test  $\varphi \in \mathcal{D}(H^\dagger)$  [1], llegamos a:

$$\langle \psi | H \varphi \rangle = \mathcal{G} + \langle H \psi | \varphi \rangle, \quad (1.38)$$

con:

$$\begin{aligned} \mathcal{G} = & \frac{\hbar^2}{2m_2} [\psi^*(a+) \varphi'(a+) - \psi'^*(a+) \varphi(a+)] \\ & - \frac{\hbar^2}{2m_1} [\psi^*(a-) \varphi'(a-) - \psi'^*(a-) \varphi(a-)] \end{aligned} \quad (1.39)$$

Como ya se demostró en [1], la condición necesaria y suficiente para la cual  $H$  es una extensión autoadjunta<sup>3</sup> es

$$M_1 = \mathcal{T}^\dagger M_2 \mathcal{T}, \quad (1.40)$$

donde,

$$M_i := \frac{\hbar^2}{2m_i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \quad (1.41)$$

---

<sup>3</sup>  $H$  es cualquier extensión autoadjunta del hamiltoniano libre  $H_0$ , dado en (1.35), definido sobre el espacio de las funciones contenido dentro del espacio de Sobolev  $W(\mathbb{R})$  y tal que estas se anulan en un entorno de  $x = a$ .

Una vez establecida la condición (1.40) para que  $H$  sea una extensión autoadjunta el siguiente paso es construir un dominio  $\mathcal{D}$  que verifique las siguientes condiciones:

1.  $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}(H^\dagger)$ , es decir, está contenido en el dominio del adjunto del operador simétrico original.
2. Para todo par de funciones  $\psi(x), \varphi(x) \in \mathcal{D}$ , se tiene que  $\mathcal{G} = 0$ .
3. Se verifica (1.40), por lo que este dominio tiene que ser compatible con la propiedad de ser el dominio de una extensión autoadjunta de  $H$ .
4. Se genere una delta de Dirac soportada en el punto  $a$  con coeficiente  $\gamma$ .

Para ello debemos encontrar unas condiciones de continuidad para las funciones y sus derivadas en el punto  $x = a$ . Puesto que las condiciones estandar de contorno

$$\psi(a-) = \psi(a+) = \psi(a), \quad \frac{\psi'(a+) - \psi'(a-)}{m} = \frac{2\gamma}{\hbar^2} \psi(a), \quad (1.42)$$

en el caso de masa constante [28] producen el deseado potencial delta, propongamos la generalización más simple compatible con el salto de masa, es decir con (1.40). La propuesta es:

$$\psi(a-) = \psi(a+) = \psi(a), \quad \frac{\psi'(a+)}{m_2} - \frac{\psi'(a-)}{m_1} = \frac{2\gamma}{\hbar^2} \psi(a). \quad (1.43)$$

Es decir, las funciones son continuas en  $a$  y el salto de sus derivadas primeras depende de las dos masas y del valor de la función en  $a$ . Es muy fácil comprobar que las funciones satisfaciendo estas condiciones de empalme en  $a$  determinan el dominio de una extensión autoadjunta de  $H$ . Para ello no tenemos más que escribir la forma explícita de  $\mathcal{T}$ , que viene dada por (ecuación (27) de [1])

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2m_2\gamma/\hbar^2 & m_2/m_1 \end{pmatrix}, \quad (1.44)$$

que cumple la ecuación (1.40), y de este modo las condiciones de continuidad (1.43) determinan un dominio para la extensión autodadjunta de  $H$ .

En los siguientes capítulos se aplicarán los fundamentos teóricos presentados en este.



## Capítulo 2

# Trabajos originales publicados en esta Tesis Doctoral

El contenido del presente capítulo ha sido publicado en los siguientes trabajos:

- 2.1 *A one-dimensional model of resonances with a delta barrier and a mass jump.* J.J. Alvarez, M. Gadella, F.J.H. Heras and L.M. Nieto. Physics Letters A, **373**, 4022-4027 (2009).
- 2.2 *A study of resonances in a one dimensional model with singular Hamiltonian and mass jump.* J.J. Alvarez, M. Gadella and L.M. Nieto. International Journal of Theoretical Physics, **50**, 2161-2169 (2011).
- 2.3 *Dirac comb with a periodic mass jump.* J.J. Alvarez, M. Gadella and L.M. Nieto. Revista Mexicana de Física, **59**, 606-612 (2013).

En las siguientes secciones se proporcionará una introducción sobre estos trabajos publicados que componen el núcleo de la presente Tesis Doctoral.

### 2.1. Modelos con una barrera impenetrable en el origen

En esta Sección se presentarán los resultados derivados del primero de los artículos anteriormente mencionados. En este trabajo se investigan modelos tridimensionales con restricciones del tipo  $\ell = 0$ , donde  $\ell$  es el momento angular orbital, cuyo potencial tiene simetría esférica. En nuestra discusión vamos a considerar una o más barreras tipo delta y, eventualmente, acompañadas de un salto de masa en el mismo punto. Para proceder a este estudio, lo primero

que tenemos que hacer es definir las condiciones que hacen a los hamiltonianos autoadjuntos en estos casos, usando la teoría de extensiones presentada a lo largo de la subsección previa 1.1.1. Nuestro objetivo es además *identificar a las resonancias y su comportamiento*. Una de las motivaciones esenciales y más importantes de la construcción de estos modelos es justamente la de obtener *modelos no triviales y quasi-solubles de resonancias en Mecánica Cuántica no relativista* dado que sabemos que estas resonancias existen gracias a la presencia del potencial delta de Dirac.

El problema que se nos presenta es que los estados resonantes no son expresables mediante funciones de cuadrado integrable. De hecho son autofunciones de  $H$  con autovalores complejos lo que produce que, incluso en modelos unidimensionales, dichas autofunciones sean exponencialmente divergentes.

La cuestión es ahora: ¿cómo podemos calcular las resonancias en sistemas como el presente? Sabemos que las resonancias están determinadas por pares de polos de la prolongación analítica de la “matriz”  $S$  y que si operamos en la representación de momentos, la matriz  $S$  va a ser una función del momento  $k$ ,  $S(k)$ .

Veamos cómo podemos proceder en el caso más simple: una delta de Dirac, sin salto de masa, soportada sobre el punto  $x = a$  junto con una barrera de potencial infinito situada en el origen del eje real. Las soluciones del problema vienen definidas por los dos intervalos en que queda partido el eje real. En el intervalo  $[0, a]$ , la función de onda será de la forma [1]:

$$\psi_I(x) = \frac{1}{k} \sin(kx), \quad (2.1)$$

donde la solución en esta región está condicionada por la condición

$$\psi_I(0) = 0,$$

que vamos a mantener en cualquier caso (podemos consultar un estudio detallado sobre esta motivación en [15], al principio del Capítulo 5). También es usual escoger

$$\psi'_I(0) = 1,$$

de aquí que nuestra solución en esta región tenga la forma (2.1).

Por otro lado, en la semirrecta  $[a, \infty)$ , la solución general ha de tener la forma [1]:

$$\psi_{II}(x) = C(k)e^{ikx} + D(k)e^{-ikx} \propto [e^{-ikx} + S(k)e^{ikx}]. \quad (2.2)$$

De aquí que, obviamente, los polos de  $S(k)$  a los que aludíamos anteriormente (matriz  $S$  en representación de momentos) coincidan con los ceros de  $D(k)$ . Por lo tanto, los polos resonantes serán las soluciones de la ecuación  $D(k) = 0$ .



Cuando  $D(k) = 0$  tenemos en (2.2) una onda saliente pura; sin onda incidente. Por este motivo a dicha condición se la suele llamar *purely outgoing boundary condition*. Diremos entonces que este tipo de condiciones nos determinan los polos resonantes. La correspondiente función de onda solución del problema sin salto de masa definido en la Sección 2 de [1] con  $k$  una solución de  $D(k) = 0$  es el llamado vector o función de Gamow, que es solución del problema de autovalores  $H\psi(x) = E\psi(x)$  con  $E$  complejo.

Debemos tener en cuenta que, la conexión entre  $\psi_I(x)$  y  $\psi_{II}(x)$  en  $a$ , debe de hacerse usando las condiciones (1.42). Esto es lo que debe de determinar  $C(k)$  y  $D(k)$ .

Además, las soluciones de la ecuación  $D(k) = 0$  son complejas (y cuando decimos complejas queremos decir con partes real e imaginaria distintas de cero). Las formas explícitas de  $C(k)$  y  $D(k)$  aparecen en las ecuaciones (8) de [1]. Obsérvese que  $D(k) = 0$  es equivalente a que  $D^*(k) = 0$ , donde  $*$  significa conjugación compleja. Por la forma explícita de  $D(k)$ , vemos que si  $k$  es una solución de  $D(k) = 0$ , entonces  $-k^*$  debe de ser una solución de  $D^*(k) = 0$ . Los polos resonantes aparecen en pares de la forma que deben<sup>1</sup>.

Las soluciones a la ecuación  $D(k) = 0$  nos proporcionan la información relativa a *dónde* están los polos resonantes, pero nada sobre su multiplicidad, como se verá a continuación. Supongamos que  $k_0$  es un polo resonante arbitrario. En este caso  $D'(k_0) \neq 0$ , lo que significaría que todos los polos resonantes son simples. En un modelo como este, no habría resonancias de polos múltiples (también llamadas degeneradas). Pudiera haber resonancias de polos múltiples en otros modelos y, de hecho, vamos a discutir un modelo con resonancias degeneradas (polos dobles). Por razones que luego se discutirán, no es posible con este tipo de modelos obtener resonancias de orden mayor que dos.

No parece en cambio que pudiera haber resonancias representadas por singularidades esenciales, si la prolongación analítica de  $S(k)$  se construye de acuerdo con el principio de causalidad [15]. El argumento para esta aserción sería el siguiente; supongamos que  $S(k)$  tuviera un par de singularidades esenciales en el semiplano inferior localizadas en los puntos  $k_0$  y  $-k_0^*$ ; supongamos también que  $k_0$  está en el tercer cuadrante. La prolongación analítica se ha hecho de tal manera que

$$S^{-1}(k_0) := S(-k_0).$$

Pero si  $S(k)$  tiene una singularidad esencial en  $k_0$ , entonces es que  $S(k)$  tiene un cero de orden infinito en  $-k_0$ . Esto implicaría que existe un entorno de  $-k_0$  en el cual  $S(k)$  es idénticamente nula, y entonces, por el teorema

---

<sup>1</sup>Es decir, *como Dios manda* (L. Boya dixit)

de la Prolongación Analítica [38],  $S(k)$  sería idénticamente nula en todo el plano complejo. Así pues, escogeremos el primer cuadrante para  $-k_0$  porque las condiciones de causalidad van a ser las que determinen la prolongación analítica de  $S(k)$  en este cuadrante. La extensión de  $S(k)$  a los demás cuadrantes se basará, exclusivamente, en las propiedades de  $S(k)$  en el primer cuadrante [15].

A continuación se añade un salto de masa a nuestro modelo. Este salto se hace coincidir con la delta en el sentido de que si  $0 < x < a$ , la masa es  $m_1$  y si  $x > a$ , entonces es  $m_2$ . Obviamente  $m_1 \neq m_2$ .

Un estudio cualitativo de las resonancias aparece en la primera parte de [1] seguido de un cálculo detallado de las resonancias así como de un estudio sobre la ubicación de las mismas.

El método para calcular las resonancias en este segundo modelo no difiere en nada esencial del primer caso, si bien los cálculos se complican bastante más [1]. Finalmente, nos hemos preguntado si el salto de masa no produciría alguna resonancia de polo múltiple; como mínimo uno doble. Se ha demostrado que tal cosa no es posible en este modelo.

## 2.2. Modelos en una dimensión, con una y dos deltas de Dirac y masa variable: resonancias

El modelo presentado en la Sección 2.1 admite una generalización obvia, que consistiría en añadir más deltas y saltos de masa en los puntos que sirven de soporte a las deltas. Lo primero es, naturalmente, considerar dos deltas soportadas en los puntos  $a$  y  $b$  con  $0 < a < b < \infty$ . Las masas serían  $m_1$  en el intervalo  $[0, a)$ ,  $m_2$  en  $[a, b)$  y  $m_3$  en  $[b, \infty)$ . Esto se hace en [2]. Lo más interesante de este trabajo es la búsqueda de resonancias de polo doble para el modelo de dos deltas con o sin salto. Las *purely outgoing boundary conditions* nos producen aquí una ecuación del tipo  $D(k) = 0$  en la que existe una resonancia doble (o de polo doble) en el valor complejo  $k_0$ , siempre y cuando se verifique simultáneamente que:

$$D(k_0) = D'(k_0) = 0 \quad y \quad D''(k_0) \neq 0, \quad (2.3)$$

donde, como siempre, las primas denotan derivadas con respecto a la variable compleja  $k$ . Se puede comprobar la existencia de resonancias dobles, para lo cual debemos ajustar los valores de los siguientes parámetros: los coeficientes de las deltas y los cocientes entre las masas. Como se muestra en [2] (ver

Anexo 2), el estudio tiene cierta complejidad dada la intratabilidad analítica de las fórmulas resultantes, por lo que se hace necesario aplicar cálculo numérico.

Como se puede apreciar en la Figura 3 de [2] (ver Anexo 2), existen resonancias dobles (polos dobles de la matriz de *scattering*  $S$ ) para el caso de dos deltas de Dirac (tres masas,  $m_1$ ,  $m_2$  y  $m_3$ ) por lo que cabe hacerse la siguiente pregunta: ¿añadiendo una tercera delta se pueden encontrar resonancias de polo triple?. Dada la complejidad de las ecuaciones obtenidas, si la respuesta fuera afirmativa, la solución sería posible tan solo usando métodos numéricos. En el caso que nos ocupa, si usamos el método desarrollado para obtener las resonancias dobles, una resonancia triple requiere una triple coincidencia: que tres curvas se corten en un único punto. Esto es imposible de demostrar mediante cálculo numérico ya que cada vez que hemos conseguido una triple coincidencia con una precisión dada, una precisión mejor mostraba que no había tal coincidencia por lo que no estamos en disposición de dar una respuesta definitiva a la pregunta que nos hemos formulado. Lo máximo que podemos decir es que, con los recursos informáticos de que se ha dispuesto para realizar el análisis numérico y, teniendo en cuenta que lo hemos llevado hasta el límite de la precisión que puede tener el software *Mathematica* en tanto en cuanto a complejidad algorítmica temporal se refiere, no hemos obtenido resultados definitivamente concluyentes. Entendemos que esto no significa que no existan las resonancias triples con tres deltas, significa más bien que no podemos demostrar su existencia con el método usado y dentro de un tiempo de cálculo razonable. La impresión es que existen, por lo que se podría conjeturar la existencia de resonancias de orden  $N$  cuando el sistema tenga  $N$  deltas, lo cual queda como línea de investigación abierta para un futuro.

## 2.3. Peine de Dirac no relativista con salto de masa

Se considera una red periódica e infinita de deltas de Dirac en una dimensión. En los puntos donde están las deltas intercalamos un salto de masa, pero de forma que el problema siga siendo periódico [3]. Para ello repetimos las masas en los intervalos entre las deltas:

- i) primero alternando dos masas  $m_1$  y  $m_2$  que se van repitiendo periódicamente,
- ii) posteriormente alternando grupos de  $l$  masas; en un intervalo la masa es

$m_1$ , en el siguiente es  $m_2$ , y así hasta  $m_l$ . Luego en el siguiente intervalo volvemos a tener  $m_1$ , a continuación  $m_2$  y así sucesivamente.

Se ha estudiado el espectro de energías en los dos casos anteriores, tanto para un peine con el mismo peso de las deltas y de carácter repulsivo  $\gamma > 0$ , como para una secuencia de deltas atractivas  $\gamma < 0$ . Para el caso repulsivo  $k \gg \gamma$ , y con una relación débil entre las masas,  $m_1 \sim m_2$ , la ecuación de bandas toma la forma clásica de un modelo de Kronig-Penney con masa constante, ver Figura 2.1, en los que el momento y la energía de la partícula están relacionados mediante la conocida ecuación

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

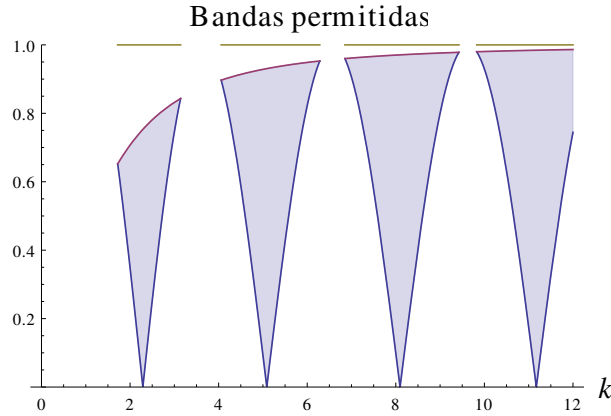


Figura 2.1: Bandas de energía con masa constante y  $\gamma > 0$

Si lo que tenemos es un conjunto infinito de deltas atractivas,  $\gamma < 0$ , con dos masas alternadas  $m_1$  y  $m_2$ , aparecen varias bandas cuya anchura depende de lo grande que sea el cociente entre ambas masas; cuanto mayor es este cociente más pequeña es la banda permitida de energías como se puede apreciar en las Figuras 5 y 6 de [3] (ver Anexos). Este es un comportamiento distinto del caso de masa constante, ver Figura 2.2, en el que solo emerge una banda de energía permitida.

En el caso de acoplamiento fuerte  $(m_1/m_2) \gg 1$ , las bandas quedan descritas por la Figura 8 de [3], (ver Anexos), en la que podemos advertir cómo después del valor crítico

$$k_m = 2\sqrt{\gamma},$$

en el que la anchura de las bandas permitidas es máxima, el tamaño de las bandas permitidas disminuye tendiendo a cero en ambos sentidos del eje real.

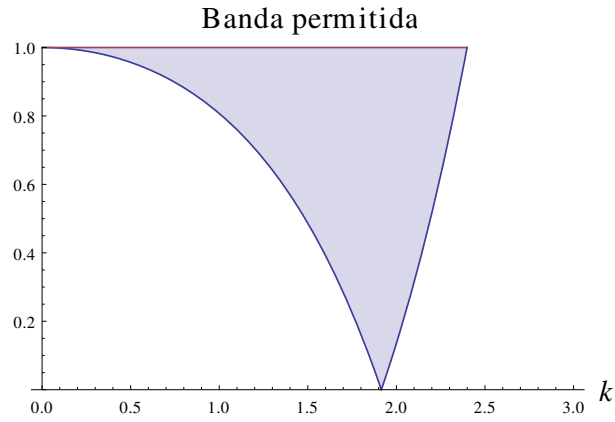


Figura 2.2: Banda de energía con masa constante y  $\gamma < 0$

Cuando generalizamos el estudio al caso de  $l$  masas comprobamos que no se induce ningún cambio sustancial en el comportamiento físico del sistema comparado con el caso de dos masas, como se puede ver en la Sección 3.1 de [3]. Donde sí aparece un comportamiento físico distinto es en el estudio de la relación entre las dos masas; en el caso de acoplamiento fuerte  $m_1 \gg m_2$  se encuentra una perturbación en las bandas de energía que produce que estas se dupliquen dependiendo del peso  $\gamma$  de las deltas mientras que en el caso en el que las masas son casi iguales,  $m_1 \approx m_2$ , el comportamiento es el mismo que un modelo de Kronig-Penney con masa constante, como no podría ser de otra manera.



## Capítulo 3

# Otros trabajos derivados de la línea de investigación

A continuación vamos a presentar varios trabajos, algunos publicados y otros en elaboración, que constituyen una continuación natural de la línea de investigación que se ha venido desarrollando en el capítulo anterior.

### 3.1. Oscilador inestable en una dimensión

En la presente sección estudiamos un modelo unidimensional propuesto por Piotr Kielanowski en [36, 37]. Para  $x < 0$  tenemos un potencial de tipo oscilador, para  $x > 0$  potencial cero (partícula libre) y en el origen un potencial singular (*point potential*). En los trabajos originales de Kielanowski et al, el potencial singular en el origen era una delta y el tratamiento se basaba en el estudio del comportamiento de las funciones de Green. Dada nuestra experiencia previa nosotros hemos decidido introducir la derivada de la delta en el origen más un salto de masa. Pero hay que hacer notar que el modelo ofrece multitud de sorpresas, incluso solamente con la presencia de una delta en el origen. E incluso se diría que sin la delta, aunque esto último pudiera parecer un poco exagerado: la idea inicial de poner la delta era la de construir un modelo resonante, pero resonancias hay incluso en ausencia de cualquier potencial puntual en el origen.

Pero las mayores sorpresas surgen cuando coinciden la delta, su derivada y un salto de masa en el origen. Estudiamos el comportamiento de las resonancias en función de unos parámetros que son fundamentalmente los coeficientes de  $\delta(x)$  y  $\delta'(x)$  y el cociente entre las masas a la derecha y a la izquierda de  $x = 0$ . En la interpretación del modelo juega un papel central el estudio numérico de las ecuaciones resultantes.

Este trabajo ha sido publicado en [5] y, como se verá a continuación, este es un modelo muy sorprendente en una dimensión. Hasta ahora, hemos estado investigando modelos resonantes con una pared impenetrable en el origen. El motivo ya se explicó: estos modelos son equivalentes a la proyección para momento angular orbital cero,  $\ell = 0$ , de modelos tridimensionales con simetría esférica. Sin embargo, lo que vamos a describir a continuación es un modelo unidimensional puro. Este tipo de modelos sirve para hacernos una idea del comportamiento de los sistemas resonantes generales.

Para comenzar, consideremos el siguiente potencial:

$$V_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2x^2 & \text{si } x < 0, \\ 0 & \text{si } x > 0, \end{cases} \quad (3.1)$$

es decir, lo que llamaríamos un *semioscilandor*. A este potencial vamos a añadirle un potencial puntual (delta más delta prima) en el origen y, eventualmente, un salto de masa.

El *objetivo* del trabajo es estudiar las resonancias del sistema y analizar su comportamiento bajo el cambio de ciertos parámetros tales como los coeficientes de la delta y de la delta prima y la relación entre las dos masas a la derecha y a la izquierda del origen.

Comencemos suponiendo que la masa es constante. El hamiltoniano que queremos analizar ahora es

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) + V_1(x) \quad (\hbar = 1), \quad (3.2)$$

donde

$$V_1(x) = a\delta(x) + b\delta'(x), \quad (3.3)$$

donde  $a$  y  $b$  son dos constantes *reales* que pueden ser tanto positivas como negativas. Propongamos las condiciones de empalme (*matching*) en el origen que nos van a generar la perturbación del potencial dada por (3.3). Estas condiciones han sido estudiadas en varias publicaciones [1, 39, 40, 41, 30]:

$$\begin{pmatrix} \psi(0+) \\ \psi'(0+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1+mb}{1-mb} & 0 \\ \frac{2ma}{1-m^2b^2} & \frac{1-mb}{1+ma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(0-) \\ \psi'(0-) \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Aunque es evidente de (3.4) que estas condiciones de contorno no están definidas para  $b = \pm 1/m$ , para estos dos valores de  $b$  es posible definir también



el potencial  $V_1$  mediante la teoría de las extensiones autoadjuntas. De hecho, las condiciones de *matching* para este caso están descritas en [30] y son:

$$\psi(0-) = 0, \quad \psi'(0+) = \frac{ma}{2} \psi(0+). \quad (3.5)$$

Sobre la resolución de la ecuación de Schrödinger asociada al hamiltoniano (3.2), no vamos a dar aquí detalles (que están descritos en el trabajo [5]). Simplemente, hemos de notar que sus soluciones deben de verificar las condiciones de *matching* indicadas. Las consecuencias que extraemos son las siguientes:

1. Cuando  $b = \pm 1/m$ , es decir cuando se verifican las condiciones de *matching* (3.5), tenemos un estado ligado de energía

$$E = -\frac{ma^2}{8}.$$

2. Cuando  $a > 0$  no hay estados ligados. Para que los haya se necesita que  $a < 0$  y que además sea inferior a una cierta cantidad umbral. Véase fórmula (25) de [5].
3. Se obtienen sendas ecuaciones trascendentes. Una de ellas sirve para calcular la energía de los estados ligados (ecuación (22) en [5]). La otra, obtenida aplicando la noción de *purely outgoing matching conditions* tiene como soluciones las resonancias del sistema (y solamente las resonancias, ecuación (27) en [5]). Sin embargo podemos obtener tanto las energías de los estados ligados como las resonancias de esta última.

A la hora de resolver la mencionada ecuación (27) de [5] deberíamos de tener en cuenta que es una ecuación compleja cuyas soluciones han de ser complejas. Esto sugiere que en realidad, tenemos dos ecuaciones reales acopladas que deben de dar dos soluciones reales, una para la parte real de la resonancia y otra para su parte compleja. Pero al intentar encontrar las resonancias de esta manera, el problema se mostró intratable.

En lugar de hacer esto, lo que hicimos en [5] fue despejar el parámetro  $a$  en (27) para obtenerlo en función de todos los demás parámetros y la incógnita, que es la energía, resultando la ecuación (28). Teniendo en cuenta que  $a$  debe de ser real, resulta que el miembro de la derecha en (28) tiene una parte imaginaria igual a cero. Escribiendo la parte real igual a un valor escogido de  $a$ , tenemos un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas que ha resultado ser factiblemente resoluble usando el software *Mathematica*. No obstante, hay que tener en cuenta que en la ecuación (28) aparece la raíz

cuadrada de la energía  $\sqrt{E}$ , que en principio tiene dos signos que hemos de considerar. De esta manera, llamaremos  $a_{\pm}$  al valor de  $a$  cuando usamos el signo  $\pm$  delante de la raíz cuadrada  $\sqrt{E}$ , respectivamente.

Lo que realmente merece la pena comentar son los resultados obtenidos, a menudo sorprendentes, que muestran la riqueza del modelo. Comencemos desde los casos más sencillos y vayamos hasta los más complejos. La numeración corresponde a resultados que queremos destacar.

### 3.1.1. Masa constante y $b = 0$

1. Podríamos pensar que lo que produce las resonancias es el potencial singular en el origen, es decir, la delta. Esto claramente sucede cuando tenemos la barrera impenetrable, si no hay delta ni barrera, no hay resonancias al menos en los casos más sencillos (no hemos estudiado lo que sucede en *todas* las extensiones autoadjuntas del hamiltoniano libre, pero físicamente pareciera que no debe de haberlas). Sin embargo, en el caso que nos ocupa, hay resonancias incluso cuando  $a = 0$  (y  $b = 0$ , claro está), es decir cuando no existe nada salvo el potencial tipo oscilador cuando  $x < 0$ . El número de resonancias es, en este caso, y como en todos los demás, infinito.
2. Cuando  $a \neq 0$ , no importa si positivo o negativo, estas resonancias comienzan a tener una parte imaginaria más pequeña, lo que significa que se tornan más estables. En grupo se van acercando al eje real,  $\text{Im}(E) = 0$ . Solamente en el límite  $|a| \mapsto \infty$ , estas resonancias convergen a estados ligados, que son justamente los estados impares del oscilador armónico. Este tipo de resultados deben de demostrarse analíticamente, lo cual se hizo en [36] usando un método basado en las funciones de Green.
3. Cuando  $a > 0$ , y sin importar el signo que hayamos escogido para  $\pm\sqrt{E}$ , aparece una resonancia que no existía cuando  $a = 0$ . Para valores muy pequeños de  $a$  esta resonancia está caracterizada por unos valores de sus partes reales e imaginarias muy grandes. Se diría que cuando  $a = 0$  la resonancia está en el infinito y que solamente cuando  $a$  alcanza valores positivos sale de allí. Este comportamiento se puede ver muy bien en la Figura 2 de [5]. Cuando  $a$  alcanza un valor de aproximadamente igual a uno, esta resonancia se comporta igual que las demás, si bien su parte real es más pequeña que la de las demás, es decir, está más próxima que ninguna al eje imaginario  $\text{Real}(E) = 0$ . Por su comportamiento inusual, por ir de alguna manera por su cuenta, hemos llamado a esta resonancia *maverick resonance*.

4. La presencia de la *maverick resonance* ha sido un resultado completamente inesperado. Hemos comprobado con cuidado que no ha sido causada por un error de cálculo de cualquier tipo; esto está completamente excluido. Esta resonancia existe para  $a > 0$  y no existe, sin embargo, cuando  $a < 0$ . Véase la Figura 4 en [5].
5. Como quedó establecido anteriormente, las resonancias aparecen como pares de polos complejos conjugados en la representación de energías. Entonces, si obtenemos el resultado

$$z_R = E_R - i\Gamma/2$$

para el valor de una resonancia, deberíamos de obtener también el valor

$$z_R^* = E_R + i\Gamma/2.$$

Esto sucede exactamente así. Basta reemplazar  $a_+$  por  $a_-$ , es decir el signo de  $\pm\sqrt{E}$ , para obtener la solución compleja conjugada. Esto lo pusimos en evidencia, comparando las figuras 2 y 5 de [5].

6. Sabemos que los estados ligados pueden existir cuando  $a < 0$  y además por debajo de un valor umbral que viene especificado en la ecuación (21) de [5]. Para calcular estos estados ligados, tomemos de nuevo la ecuación (28) en [5] y supongamos ahora que  $E$  ha de ser real y negativo. Si  $E > 0$ , entonces resulta que  $a$  debe de ser complejo, lo cual no es posible en nuestro contexto. Tomemos la raíz cuadrada positiva en  $\sqrt{E}$ , con lo que  $a$  será  $a_+$ . Se muestra que hay un único estado ligado cuando  $a$  está por debajo de este umbral. Si bien el método numérico empleado no permite mostrarlo, la impresión es que hay un estado ligado por cada valor de  $a$  por debajo del umbral. En efecto, la curva roja (inferior) en la Figura 3, no parece tener asíntota. Resumiendo: no es arriesgado conjeturar una relación uno a uno entre estos valores de  $a$  y los valores negativos de  $E$ .
7. Hagamos ahora lo mismo tomando el signo menos en  $-\sqrt{E}$ , es decir,  $a = a_- < 0$ . En este caso, el valor del momento sería

$$k = -\sqrt{-2m|E|} = -i\sqrt{2m|E|} = -i\rho \quad \text{con } \rho > 0$$

En representación de momentos estos valores son soluciones de la ecuación determinada por las *purely outgoing boundary conditions* y, por consiguiente, polos de  $S(k)$  en el semieje imaginario negativo. Corresponden por lo tanto a estados virtuales o *antibound*. Nuestras estimaciones numéricas sugieren que existe una correspondencia uno a uno

entre los valores de  $a$  entre el umbral y cero y todos los posibles valores negativos de la energía. Aquí hay otra situación atípica. Los estados virtuales en sistemas realistas son esperados a baja energía. Sin embargo en este modelo la energía de los estados virtuales tiende a infinito cuando  $-a_- \mapsto 0$ .

### 3.1.2. Masa constante y $b \neq 0$

En esta situación obtenemos los siguientes resultados:

1. Esencialmente, el comportamiento de las resonancias es el mismo que cuando  $b = 0$ . En particular, para cada valor de  $b$  aparecen las *maverick resonances* cuando  $a > 0$  tal y como sucedía con  $b = 0$ .
2. Para cada resonancia calculamos la dependencia con  $b$  de sus partes real e imaginaria. La dependencia de la parte imaginaria está descrita por la Figura 6 de [5]. Esta dependencia es *casi* simétrica con respecto a  $b = 0$ . Para los dos valores singulares  $b = \pm 1/m$  las curvas tienen como límite dos valores para los cuales  $\text{Im}(E) = 0$ . Esto sugiere la presencia de un estado ligado en ambos casos que sabemos que existe. En cuanto a la parte real de cada resonancia, vemos en la Figura 7 que crece lentamente cuando  $b < 0$  y se acerca a un valor, en el ejemplo de la Figura 7 sería  $-5$ . Luego crece bruscamente (en la Figura 7 para un valor igual a uno) hasta un valor de  $b$  un poco por encima de cero. A partir de aquí es prácticamente constante, aunque con una cierta tendencia a aumentar muy lentamente.

Un detalle que llama la atención es que las curvas descritas en las Figuras 6 y 7 son casi simétricas con respecto a  $b = 0$ , pero *no simétricas*. De alguna manera, pudiéramos haber esperado esta simetría, ya que la delta prima se aproxima mediante funciones impares, y las propiedades derivadas de esta circunstancia se traducirían en una cierta simetría alrededor de  $b = 0$ . Esta simetría es solo aproximada, lo que podría estar originada por la presencia de la perturbación delta o, más probablemente, de la asimetría del potencial principal.

No obstante, hay una segunda posibilidad. Resulta que la perturbación del tipo  $b\delta'(x)$  no está definida de manera única. Por ejemplo, las condiciones de matching

$$\psi'(0+) = \psi'(0-) = \psi'(0), \quad \psi(0+) - \psi(0-) = 2mb\psi'(0), \quad (3.6)$$

nos dan un potencial del tipo  $b\delta'(x)$  con  $a = 0$  [28]. Si ponemos la delta como un límite débil de funciones impares  $\{f_n(x)\}$ , resulta que el

hamiltoniano

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + b \delta'(x)$$

es límite en el sentido fuerte del resolvente (*strong resolvent sense*) de la sucesión de hamiltonianos [42]

$$-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + f_n(x).$$

Esto no sucede así en este caso. Un estudio de esta situación puede verse en [43]. La no unicidad de la perturbación delta prima nos indicaría un posible motivo de esta asimetría.

### 3.1.3. Resultados con masa variable

Vamos ahora a analizar qué sucede cuando además de la situación anterior tenemos un salto de masa en el origen. La función de masa sería aquí

$$m(x) = m_1 H(-x) + m_2 H(x), \quad (3.7)$$

donde  $H(x)$  es la función escalón de Heaviside, que vale cero si  $x < 0$  y uno si  $x > 0$ . En este caso, lo que hicimos en [5] fue *comenzar* el estudio con la generalidad más posible. En primer lugar, se escribe la ecuación de Schrödinger. Para ello se construye el término cinético a partir del hamiltoniano *libre*:

$$K := -\frac{1}{2} m^\alpha(x) p m^\beta(x) p m^\alpha(x), \quad (3.8)$$

donde  $m(x)$  fue definida en (3.7),  $p$  es el operador momento y  $\alpha$  y  $\beta$  son parámetros reales con la restricción

$$2\alpha + \beta = -1.$$

Obsérvese que si  $m(x)$  fuera una constante igual a  $m$  para todo valor de  $x$ , entonces este término cinético es el usual. El hamiltoniano es ahora

$$H = K + V_0 + V_1,$$

donde  $K$  es el de (3.8),  $V_0$  es el potencial del semioscilador que aparece en (3.1) y  $V_1$  es la perturbación singular para el potencial presentada en (3.3). Las condiciones de *matching* que hacen a este hamiltoniano autoadjunto están descritas en un trabajo anterior de nuestro grupo [39]. La ecuación de Schrödinger resultante es

$$\left[ -\frac{1}{2} m^\alpha(x) \frac{d}{dx} m^\beta(x) \frac{d}{dx} m^\alpha(x) + V_0(x) + a\delta(x) + b\delta'(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (3.9)$$

Teniendo en cuenta que tanto la ecuación (3.9) como la correspondiente ecuación con masa constante son ecuaciones diferenciales en distribuciones, se tiene que la igualdad (3.9) es una igualdad entre distribuciones temperadas. De ahí que las derivadas haya que tomarlas en el sentido de las distribuciones [21].

Por otro lado, la función solución  $\psi(x)$  debe de ser una función que tiene un salto en el origen. Esto sucede con o sin salto de masa y es debido a la necesidad de las condiciones de *matching* en el origen necesarias para definir la correcta extensión autoadjunta de  $H$  que usamos para definir la ecuación (3.9). Es por lo tanto necesario definir el producto de la delta y de su derivada con una función  $\psi(x)$  discontinua y con un salto en la derivada primera en  $x = 0$ . Estos productos han sido definidos de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\psi(x) \delta(x) &= \frac{\psi(0+) + \psi(0-)}{2} \delta(x), \\ \psi(x) \delta'(x) &= \frac{\psi(0+) + \psi(0-)}{2} \delta'(x) - \frac{\psi'(0+) + \psi'(0-)}{2} \delta(x).\end{aligned}\tag{3.10}$$

Esta definición se torna la usual cuando la función  $\psi(x)$  es continua en el origen, con derivada primera también continua allí. A continuación resolvemos (3.9) con las condiciones de *matching* en el origen definidas en [39] y repetimos los cálculos que ya se habían hecho, en el caso de masa constante, para calcular estados ligados y resonancias. Todo esto aparece de manera explícita entre las fórmulas (37) y (55) de [5]. A partir de aquí es necesario fijar los parámetros para el cálculo numérico. Los primeros que vamos a fijar son  $\alpha = 0$  y  $\beta = -1$ . Sabemos que esta elección es compatible con la invariancia de Galileo [44]. Definimos

$$r := m_2/m_1.$$

A todos los efectos, el parámetro relevante es el valor de  $r$  y no los valores individuales de las dos masas, por lo que podemos prescindir del valor de una de ellas. La elección  $m_2 = 1$  simplifica notablemente la ecuación (56) en [5] que sirve para calcular resonancias y estados ligados, por lo que la hemos utilizado en lo que sigue.

Nuestros cálculos numéricos, usando diferentes valores de los parámetros, exactamente igual que en el apartado de masa constante, pero añadiendo  $r$ , han dado los siguientes resultados:

1. La *maverick resonance* aparece de nuevo, aunque su comportamiento inusual solamente puede apreciarse para valores de  $r$  próximos a uno (masas con valores muy similares).
2. En el caso  $b \neq 0$ , el comportamiento de la parte imaginaria de cada resonancia es muy similar al que existía en el caso de masa constante

con una salvedad. Aquí también la gráfica de esta parte imaginaria con  $b$  muestra dos cúspides. Cuando  $b < 0$ , el abultamiento corta en dos puntos al eje real y estos dos puntos solamente dependen del valor de  $m_1$  y no de la resonancia particular que estemos estudiando. Esto tiene unas consecuencias que luego comentaremos. El cálculo está hecho para  $a_+$ , por lo que la aparición de valores de  $b$  para los cuales las resonancias tienen parte imaginaria positiva no es un problema. Cuando tomemos  $a_-$  obtendremos una figura completamente simétrica con respecto al eje real y recuperaremos el doblete de polos resonantes la que tiene la parte real negativa. En cuanto a si la cúspide, cuando  $b > 0$ , corta o no corta al eje real, el cálculo numérico no es determinante.

3. Para todas las resonancias, su parte real se comporta con  $b$  de la misma manera que cuando la masa era constante.
4. Es importante estudiar lo que sucede en los puntos de corte de la parte imaginaria de cada resonancia cuando  $b < 0$ . Para más sencillez, comencemos con  $a = 0$ . Para ambos puntos de corte, y para cada resonancia, obtenemos un estado ligado. Pues bien estos estados ligados, cuando  $a = 0$ , tienen una energía coincidente con la de los estados pares del oscilador armónico,  $E_n = 2n + 1/2$ . Cada uno de estos valores de la energía está entonces doblemente degenerado. Esta doble degeneración desaparece cuando  $a \neq 0$ , apareciendo dos valores diferentes, aunque bastante próximos entre sí. Ninguno de ellos tiene la forma de los estados ligados del oscilador, si bien mantienen el formato  $E_n = An + B$ , donde  $B$  se mantiene próximo a 2.
5. En cuanto a la presencia de estados ligados y estados virtuales, es muy similar al caso de masa constante, si bien las figuras son un tanto diferentes.

Hasta aquí la descripción de estados ligados, virtuales y resonancias en el modelo del semioscilador con o sin perturbación singular y con o sin salto de masa en el origen, tal como se presentó en [5].

## 3.2. Pozo cuadrado infinito con salto de masa: métodos numéricos

Como se ha podido comprobar, los modelos de masa variable son una constante en nuestro trabajo. Está justificado, como ya se dijo, por ser una línea de investigación bastante novedosa en Mecánica Cuántica no relativista.

En el trabajo que presentamos en esta sección se analiza el siguiente modelo: en un pozo cuadrado infinito en una dimensión se incluye un salto de masa en la mitad del pozo. Esta se aproxima luego por una sucesión de funciones de masa continuas. Se analiza el comportamiento de los primeros niveles de energía del sistema, y se comprueba que los niveles de energía de la sucesión de funciones continuas de masa convergen a los niveles de energía en el caso del salto de masa. La comprobación se hace numéricamente y se usa una extensión autoadjunta determinada del hamiltoniano con salto de masa [35].

Comencemos considerando un pozo de potencial infinito en una dimensión con masa constante. El hamiltoniano (con  $\hbar = 1$ ) se escribe de la siguiente manera ( $c > 0$ ):

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x \leq -c, \\ 0 & \text{si } -c < x < c, \\ \infty & \text{si } x \geq c. \end{cases} \quad (3.11)$$

¿Qué sucedería si en la expresión anterior supusiéramos que la masa es una función de la posición? Podemos hacer dos hipótesis. En la primera, la función de la masa con la posición  $m(x)$  la podemos suponer diferenciable. En ese caso, el término cinético del potencial tendrá la forma (3.8). La ecuación de Schrödinger libre sería entonces:

$$\frac{1}{m(x)} \varphi''(x) - \frac{m'(x)}{m^2(x)} \varphi'(x) + 2E\varphi(x) = 0. \quad (3.12)$$

Para escoger una extensión autoadjunta del hamiltoniano es conveniente dar unas condiciones de borde en los puntos  $-c$  y  $c$ . Nosotros hemos preferido usar las condiciones habituales de  $\varphi(-c) = \varphi(c) = 0$ .

Otra posibilidad sería considerar un salto de masa como el dado por (3.7), con la elección  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1$  en (3.8). En este caso, podemos encontrar una extensión autoadjunta del operador energía cinética  $K$ , donde

$$K := \begin{cases} -\frac{1}{2m_1} \frac{d^2}{dx^2} & \text{si } x < 0 \\ -\frac{1}{2m_2} \frac{d^2}{dx^2} & \text{si } x > 0 \end{cases}, \quad (3.13)$$

utilizando una condición de ajuste en el origen para las funciones de onda del dominio de la extensión. Esta condición de ajuste, vendrá determinada por una matriz  $T$ ,  $2 \times 2$ , de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} \varphi(0+) \\ \varphi'(0+) \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} \varphi(0-) \\ \varphi'(0-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & m_2/m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi(0-) \\ \varphi'(0-) \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$



### 3.2. Pozo cuadrado infinito con salto de masa: métodos numéricos

---

donde, como ya se ha dicho anteriormente,  $\psi(0+)$  y  $\psi(0-)$  representan los límites de la función  $\psi(x)$  cuando  $x$  tiende a cero por la derecha y por la izquierda respectivamente. Además, por motivos de compatibilidad con (3.12), hemos adoptado las condiciones de borde

$$\varphi(-c) = \varphi(c) = 0. \quad (3.15)$$

La solución general de la ecuación de Schrödinger con las condiciones propuestas es la siguiente:

$$\varphi(x) = A \sin(k_1(c+x)) H(-x) + B \sin(k_2(c-x)) H(x), \quad (3.16)$$

donde  $H(x)$  es la función escalón de Heaviside y

$$k_i = \sqrt{2m_i E}, \quad i = 1, 2. \quad (3.17)$$

Claramente, la ecuación (3.16) satisface la condición de borde (3.15). Si además utilizamos en (3.16) las condiciones de ajuste en el origen (3.14), obtenemos las siguientes ecuaciones:

$$B = A \frac{\sin(k_1 c)}{\sin(k_2 c)}, \quad (3.18)$$

la cual proviene de la continuidad de la función de onda en el origen, y

$$\frac{A k_1}{m_1} \cos(k_1 c) = \frac{B k_1}{m_2} \cos(k_2 c), \quad (3.19)$$

que se deriva de la forma precisa del salto en la derivada primera. Eliminando  $A$  y  $B$  entre estas dos relaciones, obtenemos una ecuación transcendente:

$$\sqrt{m_2} \tan[c\sqrt{2m_2 E}] = \sqrt{m_1} \tan[c\sqrt{2m_1 E}], \quad (3.20)$$

que nos debe proporcionar los niveles de energía para el sistema en estudio. El sistema bajo nuestra consideración es invariante frente a translaciones espaciales, por lo que cuando realicemos cálculos numéricos, vamos a considerar que la base del pozo es  $[0, 2c]$  en lugar de  $[-c, c]$ .

A continuación, vamos a desarrollar un método de cálculo para obtener estos niveles de energía. Como puede verse, el modelo aquí presentado, es un tipo de problema de Sturm-Liouville. La discusión que presentamos a continuación, ha sido expuesta en dos publicaciones [4, 45].

Notemos, en primer lugar, que la ecuación de Schrödinger (3.12) es del siguiente tipo:

$$y''(x) = F_\lambda(x, y(x), y'(x)). \quad (3.21)$$

Esta ecuación depende explícitamente del valor propio  $\lambda$ , que en este caso, va a coincidir con la energía  $E$ , que se pretende calcular. La variable independiente  $x$  varía en un cierto intervalo  $[a, b]$ , donde  $a$  y  $b$  han de ser finitos. En cualquier caso, se supone que las soluciones  $y(x)$  verifican unas condiciones de contorno del siguiente tipo:

$$c_1y(a) + c_2y'(a) = c_3, \quad d_1y(b) + d_2y'(b) = d_3, \quad (3.22)$$

donde, las constantes  $c_k$  y  $d_k$  son conocidas.

Vamos a realizar una aproximación numérica, basada en el conocido método de Taylor, en donde el grado de los polinomios usados va a depender del grado de precisión requerida. En la ecuación (3.21) vamos a imponer la condición según la cual,  $F_\lambda(x, y(x), y'(x))$  sea diferenciable hasta el orden que sea necesario en la variable  $x \in [a, b]$ .

Para realizar dicha aproximación necesitamos discretizar el intervalo sobre el que actuaremos. Con este objetivo, dividamos el intervalo  $[a, b]$  en  $m$  subintervalos de la misma longitud. Para ello determinamos los puntos

$$x_k = a + kh \quad \text{con} \quad h = (b - a)/n \quad \text{y} \quad k = 1, 2, \dots, m$$

Obviamente  $m$  depende de la precisión que deseemos. Reescribamos (3.21) como el siguiente sistema

$$y'(x) = z(x), \quad z'(x) = F_\lambda(x, y(x), y'(x)). \quad (3.23)$$

De esta forma en cada intervalo  $(x_k, x_{k+1})$  podremos aproximar las funciones  $y(x)$  y  $z(x)$  por sus respectivos polinomios de Taylor:

$$y_n(x) = \sum_{j=0}^n \frac{1}{j!} y^{(j)}(x_k) (x - x_k)^j, \quad z_n(x) = \sum_{j=0}^n \frac{1}{j!} z^{(j)}(x_k) (x - x_k)^j \quad (3.24)$$

donde las derivadas  $y^{(j)}$  y  $z^{(j)}$  se calculan por medio de la ecuación (3.21); esto es,

$$y^{(1)}(x) = z(x), \quad y^{(2)}(x) = F_\lambda(x, y(x), y'(x)), \\ y^{(3)}(x) = \frac{\partial F_\lambda}{\partial x} + z \frac{\partial F_\lambda}{\partial y} + F_\lambda \left( \frac{\partial F_\lambda}{\partial z} \right),$$

y así sucesivamente hasta alcanzar el grado de la derivada que se desee. De manera similar obtenemos las derivadas sucesivas de  $z(x)$ .

De esta manera, comenzando con la primera ecuación de (3.21), se obtienen los valores iniciales para determinar  $y_n(x)$  y  $z_n(x)$  en el intervalo  $[x_0, x_1]$

### 3.2. Pozo cuadrado infinito con salto de masa: métodos numéricos

---

el cual estará parametrizado por el autovalor  $\lambda$ . Así ya tenemos  $y_n(x_1)$  y  $z_n(x_1)$  lo cual nos permitirá calcular  $y_n(x)$  y  $z_n(x)$  para el siguiente intervalo  $[x_1, x_2]$ , y así sucesivamente.

Después de obtener la aproximación para el último intervalo, vemos que la segunda ecuación en (3.22) nos proporciona la condición

$$d_1 y(x_m) + d_2 y'(x_m) = d_3 \quad \text{con} \quad x_m = b,$$

lo que nos genera una ecuación algebraica para  $\lambda$  cuyas raíces son los autovalores que buscamos.

Una vez que hemos calculado uno de estos autovalores las soluciones segmentadas están bien definidas y, dependiendo de la precisión que deseemos, así elegiremos los valores de  $m$  y  $n$ .

Una vez definido el método de cálculo, si comparamos con otros encontramos que la implementación de este algoritmo utilizando el software *Mathematica* da excelentes resultados en cuanto a complejidad algorítmica temporal (tiempo de ejecución, ver Sección 3 de [4]) lo que nos motiva a utilizarlo en la resolución de un pozo cuadrado infinito con salto de masa.

En este caso caben dos posibilidades, utilizar un salto de masa abrupto definido a través de la función de Heaviside de la siguiente forma

$$m_\infty(x) = m_1 H(a - x) + m_2 H(x - a) = m_1 + (m_2 - m_1) H(x - a),$$

o definir una función continua que en la discontinuidad del salto de masa cumpla con la condición

$$\lim_{b \rightarrow \infty} m_b(x) = m_\infty(x). \tag{3.25}$$

No es complicado ver que una función del tipo

$$\frac{1}{1 + e^{-b(x-1/2)}}$$

cumple con la condición (3.25). De esta manera, si definimos la función de posición de la masa de la siguiente forma

$$m_b(x) = m_1 + \frac{m_2 - m_1}{1 + e^{-b(x-1/2)}}, \tag{3.26}$$

podremos resolver la ecuación de Schrödinger (3.12) siempre que fijemos un valor particular para  $m(x)$ . En nuestro caso elegimos  $m_1 = 1$ ,  $m_2 - m_1 = 1$ , que será el *paso computacional* que definiremos como  $\Delta$  y  $b = 10$ . Utilizando, además, las condiciones de borde de la función de onda en  $x = 0$  y  $x = 1$ ,

consistentes con lo ya dicho previamente, tendremos que  $\phi(0) = \phi(1) = 0$  y así determinamos las soluciones utilizando el método computacional ya presentado. El resultado obtenido muestra que las soluciones, según aumenta  $b$  se aproximan a los valores obtenidos cuando el salto de masa es abrupto pero con un procedimiento más eficiente, en cuanto a ciclos de CPU, que los clásicos y al alcance de cualquiera mediante el uso, de una forma bastante sencilla, de las funciones que proporciona un paquete de software de cálculo simbólico, ampliamente extendido, como puede ser el que hemos usado en la realización de este trabajo [4].

### 3.3. Peine de Dirac relativista en una dimensión

Hasta el momento se han abordado diversos sistemas cuánticos no relativistas sometidos, por tanto, a la dinámica de la ecuación de Schrödinger. En la presente sección iremos un paso más allá aplicando un potencial singular y un salto de masa periódicos a un sistema relativista de una dimensión. Así pues, partimos inicialmente de la ecuación de Dirac en una dimensión:

$$\left( -i\hbar\sigma_x \frac{d}{dx} + \sigma_z mc^2 + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (3.27)$$

donde  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  son las matrices de Pauli. El potencial ha de tener la forma de una matriz  $2 \times 2$  y la función de onda  $\psi(x)$ , será un espinor con dos componentes. Es bien conocido que la ecuación (3.27) es equivalente a la siguiente ecuación integral:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} V(y) G(x, y) \psi(y) dy. \quad (3.28)$$

Para el caso que nos ocupa la función de Green  $G(x, y)$  viene dada por:

$$G(x, y) = \begin{cases} -\frac{i}{2\hbar c} e^{i\eta(x-y)} \begin{pmatrix} \xi & 1 \\ 1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} & \text{si } x > y, \\ -\frac{i}{2\hbar c} e^{-i\eta(x-y)} \begin{pmatrix} \xi & -1 \\ -1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} & \text{si } x < y, \end{cases} \quad (3.29)$$

con las siguientes definiciones paramétricas

$$\xi^2 = \frac{E + mc^2}{E - mc^2}, \quad \hbar c\eta = \sqrt{E^2 - m^2c^4}. \quad (3.30)$$

### 3.3. Peine de Dirac relativista en una dimensión

---

Para resolver el caso de un potencial periódico

$$V(y + na) = V(y)$$

con período  $a$  (para cualquier  $y$  real y cualquier  $n$  entero) hemos de tener en cuenta que la función de onda habrá de satisfacer la conocida relación

$$\psi(y + na) = e^{i\mu na} \psi(y)$$

Podemos, entonces, reescribir la ecuación (3.28) de la siguiente forma:

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\mu na} \int_0^a V(y) G(x, y + na) \psi(y) dy. \quad (3.31)$$

Y, sustituyendo (3.29) en (3.31), obtener la siguiente expresión que captura el hecho de estar trabajando con un potencial periódico,

$$\begin{aligned} \psi(x) = -\frac{i}{2\hbar c} \int_0^a V(y) \left\{ \sum_{n=-\infty}^{[s/a]} e^{i\eta s} e^{i(\mu-\eta)na} \begin{pmatrix} \xi & 1 \\ 1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} \right. \\ \left. + \sum_{n=[s/a]+1}^{\infty} e^{-i\eta s} e^{i(\mu+\eta)na} \begin{pmatrix} \xi & -1 \\ -1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} \right\} \psi(y) dy, \end{aligned} \quad (3.32)$$

donde  $s := x - y$  y  $[s/a]$  es el mayor entero menor o igual que  $s/a$ .

La idea central, que nos mueve a realizar este cálculo, es obtener las bandas de energía del sistema periódico. Tendremos pues que calcular explícitamente el valor de  $\psi(x)$  en la ecuación (3.32) siendo  $V(y)$  el potencial periódico aplicado. Para ello seguiremos los siguientes pasos:

1. Primero sumaremos las siguientes series:

$$\sum_{n=-\infty}^{[s/a]} (e^{i(\mu-\eta)a})^n = -\frac{e^{i(\mu-\eta)a([s/a]+1)}}{1 - e^{i(\mu-\eta)a}} = S_-, \quad (3.33)$$

$$\sum_{n=[s/a]+1}^{\infty} (e^{i(\mu+\eta)a})^n = \frac{e^{i(\mu+\eta)a([s/a]+1)}}{1 - e^{i(\mu+\eta)a}} = S_+. \quad (3.34)$$

que nos permitirán reescribir y simplificar (3.32) sustituyendo (3.33) y (3.34), de forma que obtenemos:

$$\begin{aligned} \psi(x) = -\frac{i}{2\hbar c} \int_0^a \left[ \begin{pmatrix} \xi & 1 \\ 1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} e^{i\eta s} S_- \right. \\ \left. + \begin{pmatrix} \xi & -1 \\ -1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} e^{-i\eta s} S_+ \right] V(y) \psi(y) dy. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Sustituyendo el resultado de las sumas (3.33), (3.34) en (3.35) llegamos a una expresión general cuyos dos sumandos dependen de dos integrales del potencial periódico aplicado

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \begin{pmatrix} \xi & 1 \\ 1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} \frac{i/2\hbar c}{1 - e^{i(\mu-\eta)a}} \int_0^a dy V(y)\psi(y) e^{i[(\mu-\eta)([s/a]+1)a+\eta s]} \\ & + \begin{pmatrix} \xi & -1 \\ -1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} \frac{-i/2\hbar c}{1 - e^{i(\mu+\eta)a}} \int_0^a dy V(y)\psi(y) e^{i[(\mu+\eta)([s/a]+1)a-\eta s]} \end{aligned} \quad (3.36)$$

y que podemos notar de la siguiente forma:

$$I_{\pm}(x) = \int_0^a e^{i[(\mu\pm\eta)([s/a]+1)a\mp\eta s]} V(y) \psi(y) dy. \quad (3.37)$$

Recordemos que  $s = x - y$

2. Es aquí cuando elegimos el potencial periódico  $V(y)$ , que en este caso será el potencial de Kronig-Penney, que simplificará mucho el cálculo de estas integrales a la par que nos permitirá calcular las bandas del denominado *peine de Dirac*, en este caso, relativista:

$$V(y) = \gamma \left[ \sum_{r=-\infty}^{\infty} \delta(y - ra) \right] \mathbb{I}, \quad (3.38)$$

donde  $\gamma$  es una constante  $\gamma$  e  $\mathbb{I}$  es la matriz identidad de dimensión  $2 \times 2$ . Obviamente el único punto que contribuye a la integral es  $r = 0$ . Así pues las dos integrales de (3.37) toman la forma

$$I_{\pm}(x) = \gamma e^{i[(\mu\pm\eta)([x/a]+1)a\mp\eta x]} \psi(0), \quad (3.39)$$

siendo

$$\psi(0) = \frac{1}{2} \{ \psi(0^+) + \psi(0^-) \} \quad \text{y} \quad \psi(b^{\pm}) = \lim_{x \rightarrow b^{\pm}} \psi(x) \quad (3.40)$$

para cualquier valor real de  $b$ . Teniendo en cuenta (3.39) en (3.36), la expresión de la función de onda toma la siguiente forma:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \xi & 1 \\ 1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} \frac{iI_-(x)/2\hbar c}{1 - e^{i(\mu-\eta)a}} + \begin{pmatrix} \xi & -1 \\ -1 & \xi^{-1} \end{pmatrix} \frac{-iI_+(x)/2\hbar c}{1 - e^{i(\mu+\eta)a}}. \quad (3.41)$$

3. Nuestro siguiente paso será calcular  $\psi(0^\pm)$  y  $\psi(a^\pm)$  según están definidos en (3.40). Así, de (3.41), se obtiene

$$\psi(0^+) = iBe^{i\mu a}\psi(0) \left[ \begin{aligned} &\left( \begin{array}{cc} \xi & 1 \\ 1 & \xi^{-1} \end{array} \right) \frac{e^{-i\eta a}}{1 - e^{i(\mu-\eta)a}} \\ &- \left( \begin{array}{cc} \xi & -1 \\ -1 & \xi^{-1} \end{array} \right) \frac{e^{i\eta a}}{1 - e^{i(\mu+\eta)a}} \end{aligned} \right], \quad (3.42)$$

con  $B = \gamma/(2\hbar c)$ . Finalmente y tras un cálculo sencillo:

$$\psi(0^+) = \frac{iB}{\cos(\eta a) - \cos(\mu a)} \begin{pmatrix} i\xi \sin(\eta a) & e^{i\mu a} - \cos(\eta a) \\ e^{i\mu a} - \cos(\eta a) & i\xi^{-1} \sin(\eta a) \end{pmatrix} \psi(0). \quad (3.43)$$

Para obtener  $\psi(0^-)$ , utilizamos el hecho de que la función de onda  $\psi(x)$  es periódica y cumple que  $\psi(0^-) = e^{-i\mu a}\psi(a^-)$ , de lo cual resulta:

$$\psi(0^-) = \frac{iB}{\cos(\eta a) - \cos(\mu a)} \begin{pmatrix} i\xi \sin(\eta a) & \cos(\eta a) - e^{-i\mu a} \\ \cos(\eta a) - e^{-i\mu a} & i\xi^{-1} \sin(\eta a) \end{pmatrix} \psi(0). \quad (3.44)$$

4. Finalmente, teniendo en cuenta la relación entre los límites laterales de la ecuación (3.40) y las dos expresiones anteriores (3.43) y (3.44), llegamos a la siguiente ecuación, la cual representa una relación de consistencia matricial:

$$\psi(0) = \frac{iB}{\cos(\eta a) - \cos(\mu a)} \begin{pmatrix} i\xi \sin(\eta a) & i \sin(\mu a) \\ \sin(\eta a) & i\xi^{-1} \sin(\mu a) \end{pmatrix} \psi(0), \quad (3.45)$$

que, además, muestra que  $\psi(0)$  es un autovector de la matriz (3.45) con autovalor igual a uno. Si denotamos las componentes de  $\psi(0)$  por  $\psi_{1,2}$ , llegamos, desarrollando la ecuación de autovalores dada por (3.45), a las expresiones:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{iB}{\cos(\eta a) - \cos(\mu a)} \{i\xi \sin(\eta a) \psi_1 + i \sin(\mu a) \psi_2\}, \\ \psi_2 &= \frac{iB}{\cos(\eta a) - \cos(\mu a)} \{i \sin(\mu a) \psi_1 + i\xi^{-1} \sin(\eta a) \psi_2\}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Este es un sistema de ecuaciones lineal del tipo  $A\phi = 0$ . La única manera de no tener soluciones triviales es forzar a que  $\det A = 0$ .

Imponiendo esta condición sobre dicho sistema dado por (3.46) y (3.46), y teniendo en cuenta que

$$\xi + \xi^{-1} = 2E(\eta\hbar c)^{-1}$$

después de un poco de álgebra llegamos a la expresión que nos proporciona la condición para las bandas de energía del sistema:

$$\cos(\mu a) = \frac{1 - B^2}{1 + B^2} \cos(\eta a) + \frac{2BE}{(1 + B^2)\eta\hbar c} \sin(\eta a). \quad (3.47)$$

Esta es la misma relación de Kroning-Penney que se obtiene en [46].

### 3.3.1. Peine de Dirac relativista con salto de masa

Una vez que tenemos claro el procedimiento para el cálculo de las bandas de energía en un peine de Dirac relativista con masa constante vamos a estudiar el caso en el que tenemos un salto de masa. El estudio que sigue es original y está en fase de redacción para ser enviado a publicar.

Dividamos la recta real en segmentos de longitud  $a$  empezando por el intervalo  $[0, a]$ , como ya se hizo previamente en el caso de masa constante. Ahora, lo que haremos será definir intervalos consecutivos y alternados para la función de posición de la masa; así  $m_0$  la definimos sobre el intervalo cerrado  $[0, a]$ ,  $m_1$  sobre los intervalos  $[-a, 0]$  y  $[a, 2a]$ , de nuevo  $m_0$  sobre los intervalos  $[-2a, -a]$  y  $[2a, 3a]$ ,  $m_1$  sobre los intervalos  $[-3a, -2a]$  y  $[2a, 3a]$  y así sucesivamente. Consideramos así una partícula que se mueve por la recta real pero que cruza diferentes medios cada uno formado por un intervalo  $[na, (n + 1)a]$ . El efecto de atravesar el medio correspondiente es el mismo que sufriría una partícula que se dotara de distinta masa al pasar de un intervalo a otro.

Por simplicidad de cálculo tomaremos  $a = 1$  en lo sucesivo lo cual no restringe en ninguna medida la generalidad de los resultados que están por venir.

Para este caso volveremos a usar la expresión (3.28) para la función de onda, aunque, como es natural, deberemos reemplazar la función de Green original dada por (3.29) por una que tenga en cuenta la segmentación en intervalos de la recta real. Teniendo en cuenta que estamos tratando con un sistema periódico de dos masas, se propone la siguiente generalización de (3.29) al caso que nos ocupa:

$$G(x, y; E) = -\frac{i}{2\hbar c} \sum_{j=0,1} \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \Theta(2m + j - x)\Theta(x - 2m - j + 1) \Theta(2n + j - y)\Theta(y - 2n - j + 1) \mathbb{M}_j e^{in_j|s|}, \quad (3.48)$$



### 3.3. Peine de Dirac relativista en una dimensión

---

donde  $s := x - y$ ,

$$\eta_j = \frac{\sqrt{E^2 - m_j^2 c^4}}{\hbar c}, \quad j = 0, 1, \quad (3.49)$$

y

$$\Theta(x) := \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0, \\ 1/2 & \text{si } x = 0, \\ 1 & \text{si } x > 0, \end{cases} \quad \mathbb{M}_j = \begin{pmatrix} \xi_j & \text{sign}(s) \\ \text{sign}(s) & \xi_j^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.50)$$

donde la función  $\text{sign}(s)$  nos proporciona el signo de  $s$ , ya sea  $+1$  ó  $-1$ , y

$$\xi_j^2 = \frac{E + m_j c^2}{E - m_j c^2}, \quad j = 0, 1. \quad (3.51)$$

Ahora la solución de la función de onda toma la forma:

$$\psi(x) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{i2\mu p} \int_0^2 \psi(y) G(x, y + 2p; E) V(y) dy, \quad (3.52)$$

donde asumimos un periodo igual a 2 al haber asumido  $a = 1$ . La función de onda (3.52) podemos reescribirla de la siguiente manera:

$$\psi(x) = 2(A_0(x)\psi(0) + A_1(x)\psi(1)), \quad (3.53)$$

con

$$A_0(x) = \frac{U_0}{2} \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{2i\mu p} G(x, 2p; E),$$

$$A_1(x) = \frac{U_0}{2} \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{2i\mu p} G(x, 2p + 1; E), \quad (3.54)$$

donde  $U_0$  son los coeficientes de las deltas. Al igual que hemos hecho en el comienzo de esta Sección 3.3, para cualquier entero  $n$ ,  $\psi(n)$  denotará el valor promedio de los límites por la derecha y por la izquierda de  $\psi(x)$  en  $n$ . Es importante darse cuenta de que (3.48) se puede simplificar ya que, como no es difícil comprobar,

$$\left[ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta(2m + j - y) \Theta(y - (2m + j - 1)) \right] = \frac{1}{2}, \quad (3.55)$$

lo que nos simplificaría uno de los sumatorios quedando el término reducido como sigue:

$$\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(2n + j - x) \Theta(x - (2n + j - 1)). \quad (3.56)$$

Después de esta simplificación en (3.56), la expresión (3.48) para la función de Green queda de la siguiente manera:

$$G(x, y; E) = \frac{-i}{4\hbar c} \sum_{j=0}^1 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(2n + j - x) \Theta(x - (2n + j - 1)) \times \begin{pmatrix} \xi_j & \text{sign}(s) \\ \text{sign}(s) & \xi_j^{-1} \end{pmatrix} e^{in_j|s|}. \quad (3.57)$$

Como quiera que lo que buscamos es una relación de consistencia para (3.53) necesitaremos calcular  $A_0(0)$ ,  $A_0(1)$ ,  $A_1(0)$  y  $A_1(1)$ , condición necesaria para obtener una expresión para las bandas de energía del sistema. Una propiedad muy importante de estas cuatro matrices es que solo dos de ellas son linealmente independientes. Nótese que, de las ecuaciones en (3.54) y (3.57), obtenemos

$$A_0(0) \implies \begin{cases} x = 0 \\ y = 2p \end{cases} \implies |s| = |2p| \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(2n + j) \Theta(-(2n + j - 1)) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(2n + j) \Theta(1 - (2n + j)) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(\alpha_{nj}) \Theta(1 - \alpha_{nj}), \quad (3.58)$$

donde  $\alpha_{nj} = 2n + j$ . Si ahora hacemos lo mismo para  $A_1$  en el punto  $x = 1$ , obtenemos

$$A_1(1) \implies \begin{cases} x = 1 \\ y = 2p + 1 \end{cases} \implies |s| = |2p| \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(2n + j - 1) \Theta(1 - (2n + j - 1)) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(\alpha_{nj}) \Theta(1 - \alpha_{nj}). \quad (3.59)$$

Lo que nos produce una primera relación entre  $A_0(0)$  y  $A_1(1)$  a partir de la relación que emerge entre las funciones de Green evaluadas en  $(0, 2p)$  y  $(1, 2p + 1)$

$$G(0, 2p; E) = G(1, 2p + 1; E) \implies A_0(0) = A_1(1) \quad (3.60)$$

que, en este caso, es una relación trivial. Para el siguiente caso, se encuentra que

$$A_0(1) \implies \begin{cases} x = 1 \\ y = 2p \end{cases} \implies |s| = |2p - 1|, \quad (3.61)$$

$$A_1(0) \implies \begin{cases} x = 0 \\ y = 2p + 1 \end{cases} \implies |s| = |2p + 1|.$$

Se puede apreciar que el valor de  $|s|$  para  $A_0(1)$  es distinto del de  $|s|$  para  $A_1(0)$ , de manera que, para encontrar la relación entre  $A_0(1)$  y  $A_1(0)$ , es conveniente realizar el siguiente cambio de índices:  $p \mapsto p + 1$ , tal que

$$A_0(1) = \frac{-iU_0}{8\hbar c} \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{2i\mu(p+1)} \left[ \sum_{j=0}^1 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(2n + j - 1) (\Theta(1 - (2n + j - 1))) \right. \\ \left. \times \begin{pmatrix} \xi_j & -\text{sign}(2p + 1) \\ -\text{sign}(2p + 1) & \xi_j^{-1} \end{pmatrix} e^{in_j|2p+1|} \right] = e^{2i\mu} A_1(0). \quad (3.62)$$

La fase  $e^{2i\mu}$  no tiene ninguna influencia en la composición de las bandas de energía, aunque jugará un papel relevante en el caso de un cristal semi-infinito. Las ecuaciones (3.60) y (3.62) son esenciales para encontrar la ecuación de consistencia que estamos buscando. De los valores de la función de onda  $\psi(x)$ , obtenida en (3.53), evaluada en los puntos  $x = 0$  y en  $x = 1$ :

$$\psi(0) = 2(A_0(0)\psi(0) + A_1(0)\psi(1)), \quad (3.63)$$

$$\psi(1) = 2(A_0(1)\psi(0) + A_1(1)\psi(1)), \quad (3.64)$$

obtenemos, teniendo en cuenta que  $A_0(1) = e^{2i\mu} A_1(0)$  y  $A_0(0) = A_1(1)$ :

$$(2A_0(0) - \mathbb{I})\psi(0) + 2A_1(0)\psi(1) = 0, \\ 2e^{2i\mu} A_1(0)\psi(0) + (2A_0(0) - \mathbb{I})\psi(1) = 0, \quad (3.65)$$

donde  $\mathbb{I}$  es la matriz identidad de dimensión  $2 \times 2$ . Llegados a este punto conviene recordar que  $A_i(0)$  y  $A_i(1)$ ,  $i = 0, 1$ , también son matrices de dimensión  $2 \times 2$ . Las ecuaciones de (3.65) forman un sistema de cuatro ecuaciones con

cuatro incógnitas que son las componentes de los dos espinores bidimensionales  $\psi(0)$  y  $\psi(1)$ . Este sistema de ecuaciones dado por (3.65) debería no tener solo la solución trivial de forma que podamos extraer soluciones con sentido físico, así que exigiremos al determinante de los coeficientes de (3.65) que sea distinto de cero. Esta exigencia nos lleva a:

$$\begin{aligned} \det \begin{pmatrix} 2 \left( A_0(0) - \frac{\mathbb{I}}{2} \right) & 2A_1(0) \\ 2e^{2i\mu} A_1(0) & 2 \left( A_0(0) - \frac{\mathbb{I}}{2} \right) \end{pmatrix} &= 0 \\ \implies \det \left[ \left( A_0(0) - \frac{\mathbb{I}}{2} \right)^2 - e^{2i\mu} A_1^2(0) \right] &= 0 \\ \implies \det \left[ A_0(0) + e^{i\mu} A_1(0) - \frac{\mathbb{I}}{2} \right] \det \left[ A_0(0) - e^{i\mu} A_1(0) - \frac{\mathbb{I}}{2} \right] &= 0. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Obviamente nos queda calcular la forma explícita de  $A_i(0)$ ,  $i = 0, 1$ . Para ello lo primero que haremos será darnos cuenta de que  $A_1(0)$  ya fue calculado, aunque no explícitamente, en (2.2). De forma análoga, en (3.54) y en (3.57), se determinó  $A_0(0)$ . Por razones de completitud se proporciona de manera explícita la forma de ambas:

$$\begin{aligned} A_0(0) &= -\frac{iU_0}{8\hbar c} \sum_{j=0}^1 \sum_{n,p=-\infty}^{\infty} e^{2i\mu p} \theta(2n+j) \theta(-(2n+j-1)) e^{in_j|2p|} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \xi_j & -\text{sign}(2p) \\ -\text{sign}(2p) & \xi_j^{-1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.67)$$

$$\begin{aligned} A_1(0) &= -\frac{iU_0}{8\hbar c} \sum_{j=0}^1 \sum_{n,p=-\infty}^{\infty} e^{2i\mu p} \theta(2n+j) \theta(-(2n+j-1)) e^{in_j|2p+1|} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \xi_j & -\text{sign}(2p+1) \\ -\text{sign}(2p+1) & \xi_j^{-1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Nótese que

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta(2n+j) \theta(-(2n+j-1)) = \frac{1}{2} \quad (3.69)$$

es un factor común en (3.67) y en (3.68), de manera que ambas expresiones se simplifican. Estas versiones simplificadas de  $A_i(0)$ ,  $A_i(1)$ ,  $i = 0, 1$ , se pueden

### 3.3. Peine de Dirac relativista en una dimensión

reescribir de una manera incluso más compacta si definimos las matrices  $\sigma_j^l$  y  $\tau_j^l$ :

$$\begin{aligned}\sigma_j^l &= \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{i(2p\mu + \eta_j |2p|)} (\text{sign } p)^l, \quad l = 0, 1, \\ \tau_j^l &= \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{i((2p+1)\mu + \eta_j |2p+1|)} (\text{sign}(2p+1))^l, \quad l = 0, 1.\end{aligned}\tag{3.70}$$

de dimensión  $2 \times 2$  cuyos elementos diagonales vienen indexados por  $l = 0$  y los no diagonales por  $l = 1$ . Así podremos escribir en una forma más compacta  $A_0(0)$  y  $A_1(0)$ , en términos de las mencionadas matrices definidas en (3.70), de forma que finalmente tendremos:

$$\begin{aligned}A_0(0) &= -\frac{iU_0}{8\hbar c} \begin{pmatrix} \xi_0 \sigma_0^0 + \xi_1 \sigma_1^0 & -(\sigma_0^1 + \sigma_1^1) \\ -(\sigma_0^1 + \sigma_1^1) & \xi_0^{-1} \sigma_0^0 + \xi_1^{-1} \sigma_1^0 \end{pmatrix} = A_1(1), \\ A_1(0) &= -\frac{iU_0}{8\hbar c} e^{-i\mu} \begin{pmatrix} \xi_0 \tau_0^0 + \xi_1 \tau_1^0 & -(\tau_0^1 + \tau_1^1) \\ -(\tau_0^1 + \tau_1^1) & \xi_0^{-1} \tau_0^0 + \xi_1^{-1} \tau_1^0 \end{pmatrix} = e^{-2i\mu} A_0(1).\end{aligned}\tag{3.71}$$

Utilizando la siguiente notación:

$$B := \frac{U_0}{2\hbar c}, \quad u_j^l := \sigma_j^l + \tau_j^l, \quad v_j^l := \sigma_j^l - \tau_j^l,\tag{3.72}$$

las matrices de consistencia, a partir de las cuales obtendremos las bandas de energía, toman la forma:

$$\begin{aligned}A_0(0) + e^{i\mu} A_1(0) - \frac{1}{2}\mathbb{I} &= -\frac{iB}{4} \begin{pmatrix} \xi_0 u_0^0 + \xi_1 u_1^0 & -(u_0^1 + u_1^1) \\ -(u_0^1 + u_1^1) & \xi_0^{-1} u_0^0 + \xi_1^{-1} u_1^0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\mathbb{I}, \\ A_0(0) - e^{i\mu} A_1(0) - \frac{1}{2}\mathbb{I} &= -\frac{iB}{4} \begin{pmatrix} \xi_0 v_0^0 + \xi_1 v_1^0 & -(v_0^1 + v_1^1) \\ -(v_0^1 + v_1^1) & \xi_0^{-1} v_0^0 + \xi_1^{-1} v_1^0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\mathbb{I}.\end{aligned}\tag{3.73}$$

Se puede ver que la estructura de ambas matrices es idéntica, lo que nos lleva a unas ecuaciones de bandas muy similares:

$$\det \left\{ -\frac{iB}{4} \left[ \begin{pmatrix} \xi_0 u_0^0 + \xi_1 u_1^0 & -(u_0^1 + u_1^1) \\ -(u_0^1 + u_1^1) & \xi_0^{-1} u_0^0 + \xi_1^{-1} u_1^0 \end{pmatrix} - \frac{2}{iB} \mathbb{I} \right] \right\} = 0.\tag{3.74}$$

Desarrollando los dos determinantes obtenemos las siguientes ecuaciones de bandas:

$$(u_0^1 + u_1^1)^2 - \left( \xi_0 u_0^0 + \xi_1 u_1^0 - \frac{2i}{B} \right) \left( \xi_0^{-1} u_0^0 + \xi_1^{-1} u_1^0 - \frac{2i}{B} \right) = 0, \quad (3.75)$$

$$(v_0^1 + v_1^1)^2 - \left( \xi_0 v_0^0 + \xi_1 v_1^0 - \frac{2i}{B} \right) \left( \xi_0^{-1} v_0^0 + \xi_1^{-1} v_1^0 - \frac{2i}{B} \right) = 0. \quad (3.76)$$

Utilizando las formas explícitas de  $u_j^l$  y  $v_j^l$  derivadas de (3.75) y de (3.76):

$$u_j^0 = \frac{i \sin \eta_j}{\cos \mu - \cos \eta_j}, \quad u_j^1 = -\frac{i \sin \mu}{\cos \mu - \cos \eta_j}, \quad (3.77)$$

$$v_j^0 = -\frac{i \sin \eta_j}{\cos \mu + \cos \eta_j}, \quad v_j^1 = -\frac{i \sin \mu}{\cos \mu + \cos \eta_j}, \quad (3.78)$$

que, además cumplen la siguiente propiedad:  $v_j^l = u_j^l(\eta_j + \pi)$ , llegamos a la expresión que representa los estados energéticos permitidos, la ecuación de bandas:

$$\begin{aligned} 4 - \frac{B^2(U+V)^2 \sin \mu}{U^2 V^2} + \left( \frac{B \sin \eta_0}{U} - \left( \frac{1}{\xi_0} + \xi_0 \right) \right)^2 - \left( \frac{1}{\xi_0} + \xi_0 \right)^2 \\ + \left( \frac{B \sin \eta_1}{V} - \left( \frac{1}{\xi_1} + \xi_1 \right) \right)^2 - \left( \frac{1}{\xi_1} + \xi_1 \right)^2 \\ + \left( \frac{B \sin \eta_0}{U} \right) \left( \frac{B \sin \eta_1}{V} \right) \left( \left( \frac{\xi_0}{\xi_1} \right)^{-1} + \left( \frac{\xi_0}{\xi_1} \right) \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.79)$$

con  $U$  y  $V$  definidos de la siguiente forma:

$$U = \cos \mu - \cos \eta_0 \quad \text{y} \quad V = \cos \mu - \cos \eta_1. \quad (3.80)$$

Dado que lo que queremos estudiar de la ecuación de bandas es la relación del cambio de masa en las discontinuidades con los estados energéticos del sistema, vamos a reescribir la ecuación (3.79) en función del cociente entre las dos masas  $r = \frac{m_0}{m_1}$  de forma que eliminaremos también las  $\xi_j$  y las  $\eta_j$ . Teniendo en cuenta las relaciones entre las  $\xi_j$  y las  $\eta_j$ , con la masa y la energía que ya aparecen en la ecuación (3.30) es muy sencillo encontrar, particularizando (3.30) para cada masa:

$$\left( \frac{\eta_0}{\eta_1} \right)^2 = \frac{e^2 - r^2}{e^2 - 1} \quad \text{con} \quad e = \frac{E}{m_1 c^2}. \quad (3.81)$$

### 3.3. Peine de Dirac relativista en una dimensión

Utilizando unidades naturales y escribiendo  $m_0$  en unidades de  $m_1$  (esto es, haciendo  $m_1 = 1$ ) llegamos a las siguientes expresiones para las  $\eta_j$ :

$$\eta_0^2 = e^2 - r^2 \eta_1^2 = e^2 - 1, \quad (3.82)$$

que combinadas con la relación

$$\left( \frac{1}{\xi_j} + \xi_j \right) - \frac{2E}{\eta_j} = 0 \quad \text{con } j = 0, 1, \quad (3.83)$$

que ya aplicamos en el caso de masa constante para obtener la ecuación (3.47) y que se puede derivar sin mucha dificultad, podemos reescribir (3.79) como función de  $\mu$ ,  $e$  y  $r$ :

$$\begin{aligned} & 4 + \frac{(2e(\cos(\sqrt{e^2-1}) - \cos \mu) + B\sqrt{e^2-1} \sin(\sqrt{e^2-1}))^2}{(e^2-1)(-\cos(\sqrt{e^2-1}) + \cos \mu)^2} \\ & + \frac{B^2 \left( \frac{\sqrt{e^2-1}(e+r)}{\sqrt{e^2-r^2}(e+1)} + \frac{\sqrt{e^2-r^2}(e+1)}{\sqrt{e^2-1}(e+r)} \right) \sin(\sqrt{e^2-1}) \sin(\sqrt{e^2-r^2})}{(-\cos(\sqrt{e^2-1}) + \cos \mu)(-\cos(\sqrt{e^2-r^2}) + \cos \mu)} \\ & + \frac{(2e(\cos(\sqrt{e^2-r^2}) - \cos \mu) + B\sqrt{e^2-r^2} \sin(\sqrt{e^2-r^2}))}{(e^2-r^2)(-\cos(\sqrt{e^2-r^2}) + \cos \mu)^2} - \frac{4e^2}{e^2-r^2} \\ & - \frac{B^2(\cos(\sqrt{e^2-1}) + \cos(\sqrt{e^2-r^2}) - 2\cos \mu)^2 \sin^2 \mu}{(-\cos(\sqrt{e^2-r^2}) + \cos \mu)^2 (-\cos(\sqrt{e^2-1}) + \cos \mu)^2} - \frac{4e^2}{e^2-1} = 0. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Si realizamos el límite de  $r \rightarrow 1$ , recuperamos el límite de masa constante que con nuestras variables toma la forma:

$$\cos \mu = \frac{1-B^2}{1+B^2} \cos(\sqrt{e^2-1}) + \frac{2Be}{(1+B^2)\sqrt{e^2-1}} \sin(\sqrt{e^2-1}), \quad (3.85)$$

que da lugar a las siguiente condición para las bandas de energía permitidas, representada de la forma usual en la Figura 3.1 y con la  $e$  en el eje de abcisas.

Si lo que representamos es la primera zona de Brillouin, en su forma compacta, con el vector de Bloch,  $\mu$ , en el eje de abcisas y la energía  $e$  en el de ordenadas tendremos la Figura 3.2. Por el contrario, si hacemos que la diferencia entre las masas sea muy grande,  $r \rightarrow \infty$ , llegamos a la siguiente expresión:

$$\cos \mu = \frac{2-B^2}{2} \cos(\sqrt{e^2-1}) + \frac{B(2e-B)}{2\sqrt{e^2-1}} \sin(\sqrt{e^2-1}) \quad (3.86)$$

que, en la representación usual tiene el aspecto que vemos en la Figura 3.3 y

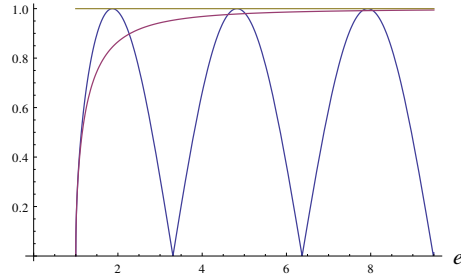


Figura 3.1: Bandas de energía relativistas con masa constante y  $B = 1$

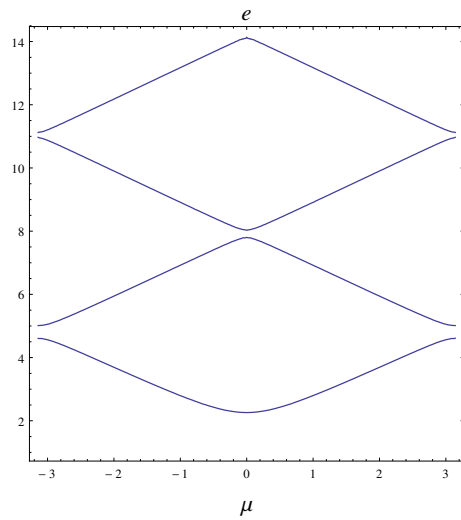


Figura 3.2: Bandas de energía relativistas con masa constante y  $B = 1$  (primera zona de Brillouin).

en la forma compacta de la primera zona de Brillouin se muestra en la Figura 3.4. En el caso relativista con masa constante dado por la fórmula (3.84), si tomamos un  $B$  pequeño se observa que las bandas permitidas tienden al continuo según aumentamos la energía  $e$ , ver Figuras 3.1 y 3.2, lo que es compatible con la *paradoja de Klein*<sup>1</sup>. Aumentar el peso de las deltas de Dirac, y consecuentemente el valor de  $B$ , solo hace que se alcance antes el continuo como se puede apreciar en la Figura 3.5, lo que era de esperar. Sin embargo, en el caso de  $r$  grande (3.86), como se puede apreciar en las dos gráficas, dadas por las Figuras 3.3 y 3.4, los estados energéticos de la red cristalina tienden al espectro discreto, según aumentamos la energía  $e$ , comportándose

<sup>1</sup>Una partícula cuántica relativista, con  $m \neq 0$ , no puede superar una barrera de potencial cuando esta es mayor que  $E - mc^2$  pero *sí* superarla cuando la barrera de potencial es suficientemente grande ( $> mc^2$ ), lo que es claramente paradójico.



### 3.3. Peine de Dirac relativista en una dimensión

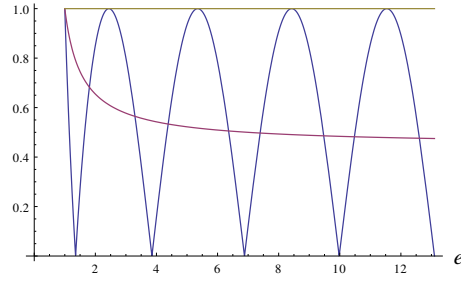


Figura 3.3: Bandas de energía relativistas con  $r$  grande y  $B = 1$ .

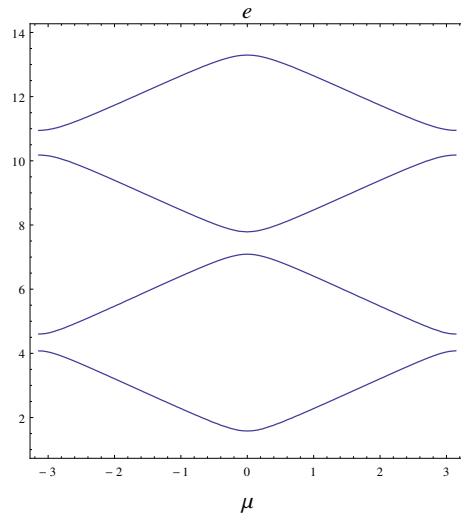


Figura 3.4: Bandas de energía relativistas con  $r$  grande y  $B = 1$  (primera zona de Brillouin).

como un modelo cristalino no relativista. El efecto de un salto de masa muy abrupto cancela, de alguna manera, el comportamiento intrínsecamente relativista que da lugar a la *paradoja de Klein* volviendo al sistema cuántico *no relativista*. Un aumento del peso de las deltas de Dirac solo agudiza más este comportamiento *no relativista* como se puede apreciar en la gráfica de la Figura 3.6.

#### 3.3.2. Peine de Dirac relativista con $N$ masas

En esta sección estudiaremos una generalización de lo que acabamos de presentar, para el caso de tener  $N$  masas distribuidas en la recta real dentro de intervalos de la forma

$$[nNa, (n + 1)Na),$$

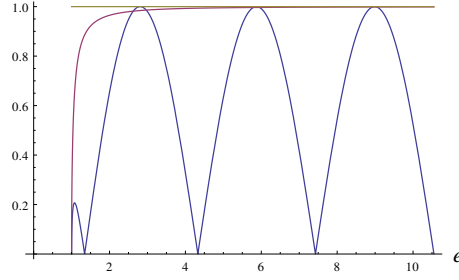


Figura 3.5: Bandas de energía relativistas con masa constante y  $B = 4$ .

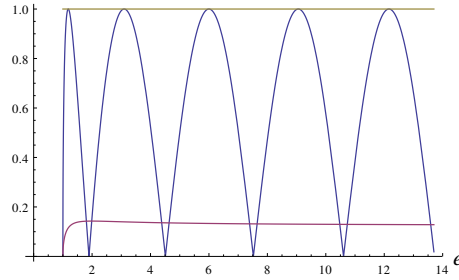


Figura 3.6: Bandas de energía relativistas con  $r$  grande y  $B = 4$ .

siendo  $N$  un número natural fijo y  $n$  un entero arbitrario tal que la línea de los reales  $\mathbb{R}$  es la unión de todos estos intervalos:

$$\mathbb{R} = \bigcup_{n=-\infty}^{\infty} [nNa, (n+1)Na).$$

Ahora, en lugar de solo dos masas, tendremos  $N$  masas:  $m_0$  en el intervalo  $[0, a)$ ,  $m_1$  en el intervalo  $[a, 2a)$ , ...,  $m_{N-1}$  en el intervalo  $[(N-1)a, Na)$ . Para mantener la periodicidad extendemos esta distribución de masas a todos los intervalos de la forma  $[nNa, (n+1)Na)$ . Con estas premisas, la ecuación (3.57) se generaliza de la siguiente forma:

$$G(x, y; E) = \frac{-i}{4\hbar c} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(2n+j-x) \Theta(x-(2n+j-1)) \times \begin{pmatrix} \xi_j & \text{sign}(s) \\ \text{sign}(s) & \xi_j^{-1} \end{pmatrix} e^{in_j|s|} \quad (3.87)$$

y la función de onda toma una forma similar a (3.31):

$$\psi(x) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{i\mu Nap} \int_0^{Na} \psi(y) G(x, y + Nap; E) V(y) dy, \quad (3.88)$$

### 3.3. Peine de Dirac relativista en una dimensión

---

con

$$V(y) = U_0 \sum_{l=0}^{N-1} \delta(y - la). \quad (3.89)$$

Sustituyendo (3.89) en (3.88), obtenemos:

$$\psi(x) = U_0 \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{i\mu Nap} \sum_{l=0}^{N-1} \psi(la) G(x, la + Nap; E). \quad (3.90)$$

Denotemos ahora por  $A_l(x)$  la siguiente expresión

$$A_l(x) = \frac{1}{N} U_0 \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{i\mu Nap} G(x, la + Nap; E), \quad (3.91)$$

para transformar (3.90) en:

$$\psi(x) = N \sum_{l=0}^{N-1} A_l(x) \psi(la). \quad (3.92)$$

Así, a modo de ejemplo, podemos ver que para el caso  $N = 1$ , el cual corresponde al caso de masa constante, tenemos

$$\psi(x) = A_0(x)\psi(0)$$

Si  $N = 2$ , entonces tendremos dos masas diferentes y en este caso obtenemos (3.53).

Lo siguiente que haremos será hallar los valores de  $A_l(x)$  en los puntos  $x = na$  donde se encuentran las deltas y las discontinuidades de masa. Dado que el sistema es periódico, podemos restringir nuestro estudio a los siguientes valores de  $n$ :  $n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ . Para todos estos valores de  $n$ , se obtiene:

$$\psi(na) = N \sum_{l=0}^{N-1} A_l(na) \psi(la), \quad (3.93)$$

que en forma matricial tiene el siguiente aspecto:

$$\mathcal{M} \times \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi(a) \\ \dots \\ \psi((N-1)a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.94)$$

donde  $\mathcal{M}$  se denomina *matriz de consistencia* y tiene la siguiente composición:

$$\begin{pmatrix} NA_0(0) - 1 & NA_1(0) & \dots & NA_{N-1}(0) \\ NA_0(a) & NA_1(a) - 1 & \dots & NA_{N-1}(a) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_0((N-1)a) & A_1((N-1)a) & \dots & A_{N-1}((N-1)a) - 1 \end{pmatrix}. \quad (3.95)$$

Nótese que la dimensión de la matriz de la ecuación (3.95) es  $N \times N$  y que sus elementos se encuentran dispuestos según los índices  $(l, n)$ . Sin pérdida de generalidad, tomaremos  $a = 1$  por simplicidad por lo que, el valor absoluto de  $s$  en la expresión de la función de Green (3.87), nos queda:

$$|s| = |n - l - Np|. \quad (3.96)$$

Aquí tenemos dos posibles situaciones. La primera sería:

$$n - l = 0, \quad (3.97)$$

y la segunda

$$n - l = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(N-1). \quad (3.98)$$

Si se cumple la primera (3.97) tenemos que  $|s| = |Np|$ , lo cual implica que

$$A_0(0) = A_1(1) = \dots = A_{N-1}(N-1) \equiv S_{Np}, \quad (3.99)$$

lo que significa que todos los elementos diagonales de la *matriz de consistencia* son iguales. En el segundo caso, representado por (3.98), tenemos:

$$\begin{aligned} n - l = \begin{cases} 1 \\ -1 \end{cases} &\implies |s| = \begin{cases} |1 - Np| \\ |1 + Np| \end{cases}, \\ n - l = \begin{cases} 2 \\ -2 \end{cases} &\implies |s| = \begin{cases} |2 - Np| \\ |2 + Np| \end{cases}, \\ &\vdots \\ n - l = \begin{cases} N-1 \\ -(N-1) \end{cases} &\implies |s| = \begin{cases} |N-1 - Np| \\ |N+1 + Np| \end{cases}. \end{aligned} \quad (3.100)$$

### 3.3. Peine de Dirac relativista en una dimensión

---

En este caso, para  $x = n$ ,  $y = l + Np$  y con  $a = 1$ , de (3.87) y (3.91) obtenemos:

$$A_l(n) = \frac{U_0}{N} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \frac{-ie^{i\mu Np}}{4\hbar c} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta(2m + j - n) \Theta(n - (2m + j - 1)) \times \begin{pmatrix} \xi_j & \text{sign}(s) \\ \text{sign}(s) & \xi_j^{-1} \end{pmatrix} e^{i\eta_j |s|}, \quad (3.101)$$

con

$$s = x - y = n - l - Np = b - Np \quad \text{con} \quad b = n - l, b = 0, \pm 1, \dots, \pm N - 1.$$

Dado que  $b$  puede ser positivo o negativo, tendremos que  $n - l = \pm|b|$  lo que da lugar a tres casos posibles:

a) Para este primer caso, en el que tenemos que  $n - l = |b|$ , escribamos

$$A_l(l + |b|) = \frac{U_0}{N} \left( \frac{-i}{4\hbar c} \right) \begin{pmatrix} \xi_j S_D & \text{sign}(s) S_{ND} \\ \text{sign}(s) S_{ND} & \xi_j^{-1} S_D \end{pmatrix} e^{i\eta_j |s|}. \quad (3.102)$$

A partir de (3.101) y algo de álgebra, la ecuación (3.102) nos da los siguientes valores para  $S_D$  y para  $S_{ND}$ :

$$S_D = e^{i\mu|b|} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta(2m + j - n) \Theta(n - (2m + j - 1)) \times e^{i\mu(|b|+Np)} e^{i\eta_j |b|+Np|}, \quad (3.103)$$

$$S_{ND} = e^{i\mu|b|} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta(2m + j - n) \Theta(n - (2m + j - 1)) \times \text{sign}(-|b| - Np) e^{i\mu(|b|+Np)} e^{i\eta_j |b|+Np|}. \quad (3.104)$$

b) La siguiente situación sería asumir que  $n - l = -|b|$ , para calcular el valor de  $A_{l+|b|}(l)$ . Este cálculo es idéntico a (3.102), salvo que el factor multiplicativo  $e^{i\mu|b|}$  hay que remplazarlo por su inversa  $e^{-i\mu|b|}$ . De esta forma, para  $b \neq 0$ , tendremos

$$A_l(l + |b|) = e^{2i\mu|b|} A_{l+|b|}(l). \quad (3.105)$$

c) Finalmente, para el caso en el que  $b = 0$ , tenemos:

$$A_l(l) = \frac{U_0}{N} \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{i\mu Np} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta(2m + j - n) \Theta(n - (2m + j - 1)) \\ \times \begin{pmatrix} \xi_j & \text{sign}(-Np) \\ \text{sign}(-Np) & \xi_j^{-1} \end{pmatrix} e^{in_j|s|}, \quad (3.106)$$

que en adelante denominaremos  $S_{Np}$ .

Nótese que la ecuación (3.99) se cumple y que es igual a  $S_{Np}$ . Nótese también que, para el caso de dos masas, estos resultados implican a aquellos calculados en la Sección 3.3.1. En particular,  $A_0(0) = A_1(1)$  y  $A_0(1) = e^{2i\mu} A_1(0)$ .

### 3.3.3. Peine de Dirac relativista y condición de borde: el cristal semi-infinito

A lo largo de esta sección estudiaremos el caso en el cual el cristal unidimensional está restringido al semieje positivo real. El caso con masa constante ya ha sido analizado en [46]. Volveremos sobre este trabajo, no solo por completitud en nuestra aproximación del caso semi-infinito con salto de masas sino también para poder recuperar los resultados que obtengamos cuando hagamos el límite de masa constante. A la izquierda de nuestro cristal, en lo que llamaremos *región de vacío*,  $x < 0$ , se asume que el potencial  $V_0 > 0$  es constante, con

$$E - mc^2 < V_0 < E + mc^2$$

En la *región de vacío* la solución obvia de la ecuación de Dirac (3.27) es

$$\psi_{vac}(x) = \begin{pmatrix} \gamma \\ 1 \end{pmatrix} e^{kx}, \quad (3.107)$$

con

$$\hbar^2 c^2 k^2 = m^2 c^4 - (E - V_0)^2, \quad \gamma^2 = \frac{E + mc^2 - V_0}{E - mc^2 - V_0}. \quad (3.108)$$

Para poder calcular la función de onda en la región del cristal  $x > 0$ , lo primero es definir las condiciones de borde, o de empalme de la función de onda en el origen [46], que, en nuestro caso, y teniendo en cuenta (3.107), vienen dadas por

$$\psi(0^+) = \psi_{vac}(0) = \begin{pmatrix} \gamma \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.109)$$

Así, la fórmula (3.43) podemos escribirla de la siguiente forma:

$$\psi(0^+) = A(0^+)\psi(0) = \psi_{vac}(0) = \begin{pmatrix} \gamma \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.110)$$

donde  $A(0^+)$  es la expresión que multiplica a  $\psi(0)$  en la ecuación (3.43).

Por medio de la ecuación (3.39), la ecuación (3.41) podemos escribirla como

$$\psi(x) = A(x)\psi(0) \implies \psi(0^+) = A(0^+)\psi(0) = \psi_{vac}(0) = \begin{pmatrix} \gamma \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.111)$$

y así escribir la ecuación (3.45) en la siguiente forma matricial

$$\psi(0) = A(0)\psi(0) \implies (A(0) - \mathbb{I})\psi(0) = 0, \quad (3.112)$$

Sustituyendo (3.111) en (3.112), finalmente tenemos

$$(A(0) - \mathbb{I})A^{-1}(0^+)\psi_{vac}(0) = 0. \quad (3.113)$$

Esta es, en forma matricial, la condición de consistencia para el caso de masa constante. Partiendo de esta expresión se puede obtener la ecuación de bandas dada en [46].

El objetivo que nos imponemos ahora es el análisis de un cristal con discontinuidades de masa en los puntos donde están soportadas las deltas de Dirac pero, en lugar de en toda la recta real como se ha hecho previamente, teniendo en cuenta que existe una barrera de potencial debido a las condiciones de borde en los límites del mismo. Estas condiciones, como veremos, afectarán de manera importante a la ecuación de bandas que calculamos en esta sección.

Comenzaremos, como hicimos al principio, con un sistema de dos masas. Esto significa que las masas se encuentran en los intervalos entre enteros del semi-eje positivo de la siguiente manera:  $m_0$  en  $[0, 1)$ ,  $m_1$  en  $[1, 2)$ ,  $m_0$  en  $[2, 3)$  y así sucesivamente. Nuestro punto de partida es la ecuación (3.53). Tomando el límite por la derecha en el origen en (3.53), tendremos

$$\psi(0^+) = 2(A_0(0^+)\psi(0) + A_1(0^+)\psi(1)) = \psi_{vac}(0). \quad (3.114)$$

Como ya vimos previamente las ecuaciones de consistencia (3.63) y (3.64) junto con las condiciones

$$A_0(1) = e^{2i\mu} A_1(0) \quad \text{y} \quad A_0(0) = A_1(1)$$

nos proporcionaron las dos ecuaciones de (3.65). De la primera de estas dos ecuaciones de (3.65), tenemos

$$\psi(1) = A_1^{-1}(0) \left( \frac{\mathbb{I}}{2} - A_0(0) \right) \psi(0), \quad (3.115)$$

y sustituyendo (3.115) en (3.114), se llega a la siguiente expresión

$$\left[ A_0(0^+) + A_1(0^+) A_1^{-1}(0) \left( \frac{\mathbb{I}}{2} - A_0(0) \right) \right] \psi(0) = \frac{1}{2} \psi_{vac}(0), \quad (3.116)$$

que podemos reescribir de la siguiente forma

$$\psi(0) = \Lambda^{-1} \psi_{vac}(0) \quad (3.117)$$

una vez que hemos definido la matriz  $\Lambda$  como sigue

$$\frac{1}{2} \Lambda = \left[ A_0(0^+) + A_1(0^+) A_1^{-1}(0) \left( \frac{\mathbb{I}}{2} - A_0(0) \right) \right].$$

Finalmente, sustituyendo (3.117) en (3.115), obtenemos una fórmula similar pero para el otro espinor

$$\psi(1) = A_1^{-1}(0) \left( \frac{\mathbb{I}}{2} - A_0(0) \right) \Lambda^{-1} \psi_{vac}(0). \quad (3.118)$$

Eliminando las variables espinoriales por medio de las sustituciones de (3.117) y (3.118) en la segunda ecuación de (3.65):

$$\left[ e^{2i\mu} A_1(0) - \left( A_0(0) - \frac{1}{2} \mathbb{I} \right) A_1^{-1}(0) \left( A_0(0) - \frac{1}{2} \mathbb{I} \right) \right] \Lambda^{-1} \psi_{vac}(0) = 0. \quad (3.119)$$

La ecuación matricial dada por (3.119) nos proporciona la ecuación de consistencia, al igual que en el caso de masa constante nos viene dada por la ecuación (3.113), para los estados de superficie en el caso del cristal semi-infinito con dos regiones alternadas con distintas masas y potenciales singulares soportados en los puntos de las discontinuidades.

Nos faltaría ahora encontrar las expresiones explícitas para  $A_0(0^+)$ ,  $A_1(0^+)$  y  $A_0(0)$  que vienen definidas por las siguientes fórmulas:

$$A_0(x) = \frac{1}{2} U_0 \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{2i\mu p} G(x, 2p; E), \quad (3.120)$$

$$A_1(x) = \frac{1}{2} U_0 \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{2i\mu p} G(x, 2p + 1; E), \quad (3.121)$$



con

$$G(x, 2p; E) = \frac{-i}{4\hbar c} \sum_{j=0}^1 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta(2n+j-x)\theta(x-(2n+j-1)) \times \begin{pmatrix} \xi_j & \text{sign}(s) \\ \text{sign}(s) & \xi_j^{-1} \end{pmatrix} e^{in_j|s|}, \quad s := x - 2p. \quad (3.122)$$

Expandiendo la suma en el índice  $j$  en (3.122):

$$G(x, 2p; E) = \frac{-i}{4\hbar c} \left[ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta(2n-x)\theta(x-(2n-1)) \begin{pmatrix} \xi_0 & \text{sign}(s) \\ \text{sign}(s) & \xi_0^{-1} \end{pmatrix} e^{in_0|s|} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta(2n+1-x)\theta(x-2n) \begin{pmatrix} \xi_1 & \text{sign}(s) \\ \text{sign}(s) & \xi_1^{-1} \end{pmatrix} e^{in_1|s|} \right]$$

y tomando el límite  $x \mapsto 0^+$ , tenemos uno de los resultados buscados para la función de Green:

$$G(0^+, 2p; E) = \frac{-i}{4\hbar c} \begin{pmatrix} \xi_1 & -\text{sign}(2p) \\ -\text{sign}(2p) & \xi_1^{-1} \end{pmatrix} e^{im|2p|}.$$

El otro se deriva de la ecuación (3.121) haciendo lo mismo:

$$G(0^+, 2p+1; E) = \frac{-i}{4\hbar c} \begin{pmatrix} \xi_1 & -\text{sign}(2p+1) \\ -\text{sign}(2p+1) & \xi_1^{-1} \end{pmatrix} e^{im|2p+1|},$$

lo que podemos utilizar para que, a partir de las ecuaciones anteriormente calculadas, (3.120) y (3.121), obtengamos dos de los resultados deseados:

$$A_0(0^+) = \frac{-iU_0}{8\hbar c} \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{2i\mu p} \begin{pmatrix} \xi_1 & -\text{sign}(2p) \\ -\text{sign}(2p) & \xi_1^{-1} \end{pmatrix} e^{im|2p|}, \quad (3.123)$$

$$A_1(0^+) = \frac{-iU_0}{8\hbar c} \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{2i\mu p} \begin{pmatrix} \xi_1 & -\text{sign}(2p+1) \\ -\text{sign}(2p+1) & \xi_1^{-1} \end{pmatrix} e^{im|2p+1|}$$

que podemos reescribir de la forma siguiente si tenemos en cuenta las ecuaciones (3.70) para reescribir (3.123):

$$A_0(0^+) = \frac{-iU_0}{8\hbar c} \begin{pmatrix} \sigma_1^0 \xi_1 & -\sigma_1^1 \\ -\sigma_1^1 & \sigma_1^0 \xi_1^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.124)$$

$$A_1(0^+) = \frac{-iU_0}{8\hbar c} e^{-i\mu} \begin{pmatrix} \tau_1^0 \xi_1 & -\tau_1^1 \\ -\tau_1^1 & \tau_1^0 \xi_1^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.125)$$

En el caso de los límites por la izquierda, obtendríamos:

$$A_0(0^-) = \frac{-iU_0}{8\hbar c} \begin{pmatrix} \sigma_0^0 \xi_0 & -\sigma_0^1 \\ -\sigma_0^1 & \sigma_0^0 \xi_0^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.126)$$

$$A_1(0^-) = \frac{-iU_0}{8\hbar c} e^{-i\mu} \begin{pmatrix} \tau_0^0 \xi_0 & -\tau_0^1 \\ -\tau_0^1 & \tau_0^0 \xi_0^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.127)$$

lo que nos proporcionaría la forma de calcular los promedios de los  $A_i(0)$  en el origen:

$$A_0(0) = \frac{-iU_0}{16\hbar c} \begin{pmatrix} \sigma_1^0 \xi_1 + \sigma_0^0 \xi_0 & -(\sigma_1^1 + \sigma_0^1) \\ -(\sigma_1^1 + \sigma_0^1) & \sigma_1^0 \xi_1^{-1} + \sigma_0^0 \xi_0^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.128)$$

$$A_1(0) = \frac{-iU_0}{16\hbar c} e^{-i\mu} \begin{pmatrix} \tau_1^0 \xi_1 + \tau_0^0 \xi_0 & -(\tau_1^1 + \tau_0^1) \\ -(\tau_1^1 + \tau_0^1) & \tau_1^0 \xi_1^{-1} + \tau_0^0 \xi_0^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.129)$$

Una vez que tenemos calculadas explícitamente todas las matrices  $A_i$ , podemos realizar un cálculo detallado de las matrices de consistencia en función de estos operadores. No se incluyen en esta sección dichas ecuaciones matriciales porque, a día de hoy, todavía son objeto de estudio y no se dispone todavía de una fórmula de recurrencia que nos pueda proporcionar la ecuación de bandas general para los estados de superficie del cristal semi-infinito.

# Capítulo 4

## Conclusiones

A lo largo de esta memoria se han presentado tres trabajos publicados en revistas científicas con parámetro de impacto [1, 2, 3], que conforman el núcleo de esta Tesis Doctoral, y cuyos resultados podemos resumir de la siguiente manera:

- Como un objetivo común a las tres publicaciones mencionadas, se ha desarrollado la teoría de extensiones autoadjuntas de operadores simétricos para el análisis y resolución de problemas que involucran masa variable y potenciales singulares. De ahí el título de esta Tesis Doctoral.
- En [1] se han estudiado las resonancias de un sistema con un potencial impenetrable en el origen de coordenadas y un potencial delta de Dirac situado en un punto  $x = a$  con  $a > 0$ , junto con una discontinuidad finita de masa en el mencionado punto. Se ha encontrado que el número de resonancias es infinito y dónde se hallan situadas.
- En el siguiente artículo [2] se generaliza el caso anterior a un sistema con dos potenciales delta de Dirac y sus respectivas discontinuidades de masa, sumado al hecho de tener un potencial impenetrable situado en el origen de coordenadas. En este caso hemos estudiado el grado de degeneración de las resonancias y se ha encontrado que un sistema como este tiene resonancias doblemente degeneradas, pero no de orden superior. Parece existir una relación entre el grado de degeneración y el número de deltas (y de discontinuidades), pero esto queda como una conjetura que queda planteada y deberá ser abordada en el futuro inmediato.
- En el tercer artículo presentado [3] se obtiene el espectro de energías de una secuencia periódica e infinita de potenciales delta de Dirac equies-

pacados (el llamado *peine de Dirac*), en el régimen no relativista, junto con un salto de masa que se repite de manera alternada por medio de dos masas distintas,  $m_0$  y  $m_1$ . Los resultados obtenidos dependen de si las deltas son atractivas o repulsivas y del cociente entre ambas masas. Si los potenciales delta son repulsivos la discontinuidad de masa no añade ningún efecto nuevo al espectro de energías resultante comparado con el caso de masa constante. En el caso de que los potenciales delta sean atractivos se observa que la anchura de las bandas de energía permitidas tiende a cero cuando el cociente entre las masas se hace muy grande. Si extendemos el estudio al caso de  $N$  masas distintas se observa que el sistema es reducible a la misma red de Bravais que en el caso de dos masas distintas lo que no permite extraer comportamientos distintos a los estudiados previamente.

- Asimismo, y como muestra de las posibilidades que esta línea de investigación tiene de cara al futuro, se han presentado otros tres trabajos en el Capítulo 3. En ellos se abordan los estudios de las resonancias en el caso en el que no tenemos un potencial impenetrable y sí un potencial oscilatorio definido en un semieje del eje real, un potencial nulo en el otro semieje y una delta y su derivada situadas ambas en el origen de coordenadas [5]. Aparece en este caso una resonancia (para el caso en que la delta es repulsiva) cuyo comportamiento se describe detalladamente en la sección (3.1) y cuya existencia depende fuertemente del valor numérico que caracteriza la repulsión del mencionado potencial.
- Otro de los trabajos presentados en el Capítulo 3, descrito con profusión en la sección (3.2) (y que puede consultarse en la referencia [4]) describe un método numérico sencillo que puede implementarse con un software de cálculo simbólico para obtener los niveles energéticos de un hamiltoniano con un espectro completamente discreto. Para ilustrar el método se ha situado, en un potencial cuadrado en una dimensión, un salto de masa y se han calculado los niveles energéticos mediante este método para el caso en el que el salto de masa es continuo y cuando este es abrupto. El método, basado en una aproximación polinómica de Taylor, proporciona los resultados esperados en ambos casos pero con una eficiencia, en ciclos de CPU, mayor que con los métodos numéricos más conocidos.
- Por último, en la sección (3.3) del Capítulo 3 presentamos el estudio de un *peine de Dirac* relativista, en una dimensión. Este trabajo todavía no se ha publicado y actualmente está en redacción. En el trabajo abordamos los mismos casos que estudiaban L. Glasser et al. en [46] pero

---

con saltos de masa. Primero con un salto de masa y después con  $N$ . Encontramos que el problema se complica bastante pero que emerge un comportamiento muy interesante cuando el cociente entre las masas involucradas se hace muy grande. Si tenemos en cuenta que en el caso relativista de masa constante el sistema de bandas de energía tiende al continuo según aumenta la energía (como debe ser), resulta muy llamativo que en el caso en el que el cociente entre las dos masas adyacentes es muy grande el espectro tienda a ser discreto, como sucedería en el caso no relativista. Es como si el hecho de introducir una discontinuidad muy fuerte en la masa volviera *no-relativista* al sistema.



# Capítulo 5

## Bibliografía

- [1] J.J. Alvarez, M. Gadella, F.J.H. Heras, L.M. Nieto, *Phys. Lett. A*, **373** 4022-4027 (2009).
- [2] J.J. Alvarez, M. Gadella, L.M. Nieto, *International Journal of Theoretical Physics*, **50**, 2161-2169 (2011).
- [3] J.J. Alvarez, M. Gadella, L.M. Nieto, *Revista Mexicana de Física*, **59**, 606-612 (2013).
- [4] J.J. Alvarez, M. Gadella, L.P. Lara, *Appl. Math. Sci.*, **8**, 4285-4300 (2014).
- [5] J.J. Alvarez, M. Gadella, L.P. Lara, F.H. Maldonado-Villamizar, *Phys. Lett. A*, **377**, 2510-2519 (2013).
- [6] G. Bachman, L. Narici, *Functional Analysis* (Academic, New York, 1966).
- [7] M. Reed, B. Simon, *Functional Analysis* (Academic, New York, 1972).
- [8] G. Bonneau, J. Faraut, G. Valent, *American Journal of Physics*, **69** (2001) 322-331.
- [9] M. Reed, B. Simon, *Fourier Analysis. Self adjointness* (Academic, New York, 1975).
- [10] M. Reed, B. Simon, *Analysis of Operators* (Academic, New York, 1978).
- [11] A. Bohm, *Quantum Mechanics: Foundations and Applications* (Springer, Berlin and New York, 3rd Edition 2001).

- [12] W.O. Amrein, J.M. Jauch, K.B. Sinha, *Scattering Theory in Quantum Mechanics* (Benjamin, Reading, Massachusetts, 1977).
- [13] R.G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles* (McGraw-Hill, New York, 1966).
- [14] M. Reed, B. Simon, *Scattering Theory* (Academic, New York, 1979).
- [15] H.M. Nussenzveig, *Causality and Dispersion Relations* (Academic, New York, 1972).
- [16] I. E. Antiniou, M. Gadella, G.P. Pronko, *J. Math. Phys.*, **39**, 2459-2475 (1998).
- [17] L. Fonda, G.C. Ghirardi, A. Rimini, *Rep. Progr. Phys.*, **41**, 587-631 (1978).
- [18] M. Gadella, F. Gómez, *Foundations of Physics*, **32**, 815-869.
- [19] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics* (Springer, Berlin, 1971).
- [20] P. Exner, *Open Quantum Systems and Feynman integrals* (Reidel, Dordrecht, 1985).
- [21] M. Gadella, L.M. Nieto, *Métodos Matemáticos Avanzados en Física e Ingeniería*, (Universidad de Valladolid, 2000).
- [22] A. Bohm, M. Gadella, *Dirac Kets, Gamow Vectors and Gelfand Triplets*, Springer Lecture Notes in Physics vol. **348** (Springer, Berlin, Heidelberg, 1989).
- [23] O. Civitarese, M. Gadella, *Phys. Rep.*, **396**, 41-113 (2004).
- [24] M. Gadella, *Int. J. Theor. Phys.*, **36**, 2271-2294 (1997).
- [25] M. Gadella, R. Laura, *Int. J. Quant. Chem.*, **81**, 307-320 (2001).
- [26] L.P. Horwitz, P. Marchand, *Rocky Mt. J. Math.*, **1**, 225 (1975).
- [27] M. Gadella, G.P. Pronko, *Fort. Phys.*, **59**, 795-859 (2011).
- [28] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, H. Holden, *Solvable Models in Quantum Mechanics* (Chelsea, New York, 2005).
- [29] Albeverio S., Kurasov P., *Singular Perturbations of Differential Operators*, Cambridge U.P., Cambridge, 1999.



- 
- [30] Kurasov P., *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **201**, 297-323, (1996).
- [31] Seba P., *Czechoslovak Journal of Physics* **26**, (1986) 667-673.  
Coutinho F.A.B., Nogami Y., Fernando Pérez J., *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **30**, (1997) 3937-3945.  
Christiansen P.L., Arnbak H.C., Zolotaryuk A.V., Ermakov V.N., Gaididei Y.B., *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **36**, (2003) 7589-7600.  
Toyama F.M., Nogami Y., *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **40**, (2007) F685-F690.  
Albeverio S., Dabrowski L., Kurasov P., *Letters in Mathematical Physics*, **45**, 33 (1998).  
Fülöp T., Tsutsui I., *Physics Letters A*, **264**, (2000) 366-374.  
Hejckik P., Cheon T., *Physics Letters A*, **356**, (2006) 290-293.  
Fernández C., Palma G., Prado H., *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **38**, (2005) 7509-7518.
- [32] Morrow R.A., Brownstein K.R., *Physical Review B* **30**, (1984) 678 -680.  
Einevoll G.T., Hemmer P.C., *Journal of Physics C*, **21**, (1988) L1193-L1198.  
Thomsen J., Einevoll G.T., Hemmer P.C., *Physical Review B* **39**, (1989) 12783-12788.  
Einevoll G.T., Hemmer P.C., Thomsen J., *Physical Review B* **42** (1990) 3485-3496.
- [33] Lévy-Leblond J.M., *Physical Review A* **52**, (1995) 1845-1849.
- [34] Moiseyev N., Lefebvre R., *Physical Review A* **64**, (2001) 052711.  
Cruz y Cruz S., Negro J., Nieto L.M., *Physics Letters A* **369**, (2007) 400-406.  
Ganguly A., Nieto L.M., *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **40**, (2007) 7265-7281.  
Ganguly A., Kuru S., Negro J., Nieto L.M., *Physics Letters A* **360**, (2006) 228-233.  
A. Ganguly, M.V. Ioffe, L.M. Nieto, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **39**, (2006) 14659-14680.
- [35] Gadella M., Kuru S., Negro J., *Physics Letters A*, **362**, (2007) 265-268.
- [36] M.G. Espinosa, P. Kielanowski, *J. Phys. Conf. Ser.*, **128**, 012037 (2008).
- [37] A.E. Domínguez, P. Kielanowski, *Int. J. Theor. Phys.*, **50**, 2252-2258 (2011).

- [38] J.E. Marsden, *Basic Complex Analysis* (Freeman, San Francisco, 1973).
- [39] M. Gadella, F.J.H. Heras, J. Negro, L.M. Nieto, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **42**, 465207 (2009).
- [40] M. Gadella, J. Negro, L.M. Nieto, *Phys. Lett. A*, **373**, 1310-1313 (2009).
- [41] M. Gadella, M.A. García-Ferrero, S. González-Martín, F.H. Maldonado-Villamizar, *Int. J. Theor. Phys.*, **377**, 2510-2519 (2013).
- [42] P. Seba, *Rep. Math. Phys.*, **24**, 111-120 (1986).
- [43] Y. Golovaty, arXiv: 1201.2610.*Methods of Functional Analysis and Topology*, **18**, 243-255 (2012).
- [44] J.M. Lévy-Leblond, *Phys. Rev. A*, **52**, 1845-1849 (1995).
- [45] M. Gadella, L.P. Lara, *Applied Math. Comp.*, **218**, 6038-6044 (2012).
- [46] W.M. Fairbairn, M.L. Glasser, M. Steslicka, *Surface Science*, **36**, 462-471 (1973).

# Apéndices y Anexos



# Apéndice A

## Artículo 1

**J.J. Alvarez**, M. Gadella, F.J.H. Heras, L.M. Nieto,

*A one dimensional model of resonances with delta barrier and mass jump,*

Physics Letters A **373**, 4022-4027 (2009)



# A one-dimensional model of resonances with a delta barrier and mass jump

J.J. Álvarez<sup>a</sup>, M. Gadella<sup>b</sup>, F.J.H. Heras<sup>b</sup>, L.M. Nieto<sup>b,\*</sup>

<sup>a</sup> Departamento de Informática, E.U. de Informática, Universidad de Valladolid, 40005 Segovia, Spain

<sup>b</sup> Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica, Universidad de Valladolid, 47071 Valladolid, Spain

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 10 July 2009

Received in revised form 27 August 2009

Accepted 1 September 2009

Available online 5 September 2009

Communicated by P.R. Holland

### PACS:

03.65.Nk

03.65.Xp

### Keywords:

Resonances

Singular potentials

Mass jump

Dirac delta

## ABSTRACT

In this Letter, we present a one-dimensional model that includes a hard core at the origin, a Dirac delta barrier at a point in the positive semiaxis and a mass jump at the same point. We study the effect of this mass jump in the behavior of the resonances of the model. We obtain an infinite number of resonances for this situation, showing that for the case of a mass jump the imaginary part of the resonance poles tend to a fixed value depending on the quotient of masses, and demonstrate that none of these resonances is degenerated.

2009 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

The concept of resonance plays a central role in Quantum Mechanics and therefore, for this reason, it is important the search for models with resonances. Some of them are based on the Friedrichs model [1] and its variants [2,3]. In addition to be exactly solvable, the Friedrichs model has the most important and basic features for the description of resonance phenomena. A second type of solvable models are those one-dimensional with a hard core at the origin. This means that the potential is infinite on the negative semiaxis. These models often come from a Hamiltonian with a spherically symmetric potential, when restricted to  $\ell = 0$ . On the other hand, Hamiltonians with singular potentials has been recently the object of study [4–7]. Combining both fields of research, the authors of a recent paper [8] study the resonances produced by a one-dimensional Hamiltonian of the form

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) + \gamma \delta(x-a), \quad \gamma > 0, a > 0, \quad (1)$$

with

$$V_0(x) := \begin{cases} \infty & \text{if } x \leq 0, \\ 0 & \text{if } x > 0. \end{cases} \quad (2)$$

In this model, the existence of an infinite number of resonances is shown. The study [8] is made by using the Krein formula that relates Green functions for potentials that are extensions of the same symmetric operator with identical deficiency indices [5]. Complex poles of the Green function are often associated to resonances. However, although the Krein formula gives precise results, it is not quite familiar to physicists. Instead, a calculation of resonances based in the idea of *purely outgoing boundary conditions* is more familiar to physicists and the eventual complexity in the equations giving the resonances is facilitated by the use of packages like Mathematica.

Resonances of physical systems can be of different types, depending on the character of the poles of the associated  $S$  matrix. Usually, the interest is centered around its simple poles, but not exclusively. Indeed, the search for systems with resonances from multiple poles of the  $S$  matrix has been initiated by Mondragón and coworkers [9]. These poles lead to degenerate resonances, for which the exponential decay on time is multiplied by a polynomial on time [3,9]. It is shown in [9] that if we replace in (1) the term  $\gamma \delta(x-a)$  by  $\gamma_1 \delta(x-a) + \gamma_2 \delta(x-b)$ , with  $\gamma_{1,2} > 0$ ,  $b > a$ , and these constants are suitably chosen, a double pole arise in the analytic continuation of the  $S$  matrix. This justifies the interest for the theoretical search of degenerated resonances. We show that in the

\* Corresponding author.

E-mail addresses: jjalvarez@infor.uva.es (J.J. Álvarez), manuelgadella1@gmail.com (M. Gadella), franciscojhh@gmail.com (F.J.H. Heras), luismi@metodos.fam.cie.uva.es (L.M. Nieto).

URL: <http://metodos.fam.cie.uva.es/~luismi/> (L.M. Nieto).

case of a single delta with a mass jump, no degenerate resonances appear.

The purpose of this Letter is the study of the resonances of a Hamiltonian similar to (1), but with an abrupt mass jump at the point  $x = a$ , at which the potential is singular. Hamiltonians with position-dependent mass have been object of study in numerous recent publications [10,11]. A Hamiltonian of variable mass has the usual form  $H = K + V$ , where  $K$  is the kinetic term and  $V$  is the potential. However,  $K$  has not the usual form  $p^2/2m$  as the mass is now a position-dependent operator and, therefore, in general it does not commute with the momentum operator  $p$ . The standard form for  $K$  is

$$K = \frac{1}{2}m^\alpha(x)pm^\beta(x)pm^\alpha(x), \tag{3}$$

where the real parameters  $\alpha, \beta$  are restricted by the condition  $2\alpha + \beta = -1$ . Here, we shall considered the following function for the mass

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & \text{if } 0 < x < a, \\ m_2 & \text{if } x > a, \end{cases} \tag{4}$$

which, in spite of its simplicity, is very interesting from the physical point of view because it can be used to represent an abrupt heterojunction between two different materials [12]. The choice in the value of the constants  $\alpha$  and  $\beta$  leads to matching conditions for the solutions of the Schrödinger equation associated to Eq. (4) at the point  $x = a$ . Each of these matching conditions will give a self-adjoint version of  $K$ .

This Letter is organized as follows. In the next section, we introduce the model without mass jump, show how resonances can be extracted from the *purely outgoing boundary condition* and show that no double resonance can exist in this case. This will allow to compare our results with the ordinary case of constant mass. Section 3 contains the main results of the present work, in which we introduce the mass jump at the singular point. First, we show that reasonable boundary conditions for the wave functions ensures the self-adjointness of the Hamiltonian. Then, we obtain the resonances in this model, showing that all of them are non degenerate. The Letter ends with the conclusions and some indications for future work.

## 2. The constant mass model

Let us consider the Hamiltonian given by (1) and (2), where the mass is constant. We divide the positive semiaxis into two parts, the segment  $[0, a]$ , that we denote as I, and the half line  $[a, \infty)$ , that we call II. Solutions of the Schrödinger equation associated to (1) should vanish at the origin, although their first derivative cannot vanish at the origin, otherwise the solution would be identically zero. If, without loss of generality, we choose  $\psi'_1(0) = 1$ , the solution in the region I for a given energy  $E$  is

$$\psi_I(x) = \frac{1}{k} \sin kx, \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2}. \tag{5}$$

To find the solution in the region II, which should be written as

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \tag{6}$$

we have to apply matching conditions for these solutions of the Schrödinger equation at the point  $x = a$ . These matching conditions are standard [4], and given by

$$\psi_I(a) = \psi_{II}(a), \quad \frac{\psi'_{II}(a) - \psi'_I(a)}{m} = \frac{2\gamma}{\hbar^2} \psi_I(a). \tag{7}$$

This gives

$$C(k) = \frac{1}{2ik} + \frac{m\gamma}{2\hbar^2} \frac{1 - e^{-2ika}}{(ik)^2},$$

$$D(k) = -\frac{1}{2ik} + \frac{m\gamma}{2\hbar^2} \frac{1 - e^{2ika}}{(ik)^2}. \tag{8}$$

In order to obtain the resonances for the present model, we shall use the *purely outgoing boundary condition*. This condition states that in the region  $x > a$  there is no incident wave, so that only the emergent wave exists. Since the emergent wave is of the form  $e^{ikx}$ , this condition implies that  $D(k) = 0$ . Carrying this condition into (8), we have that

$$f(k) = e^{2ika} - 1 + \frac{ik\hbar^2}{m\gamma} = 0. \tag{9}$$

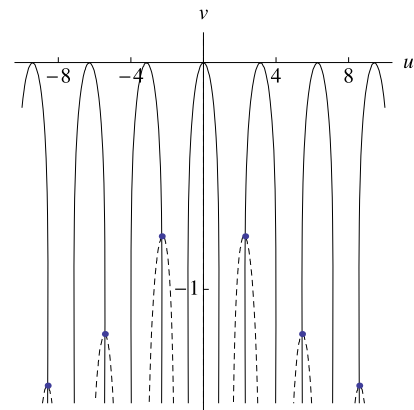
A couple of comments are in order here. First of all, although the value  $k = 0$  is a solution of Eq. (9), it should be discarded as a resonance, because  $D(0) \neq 0$  in Eq. (8), and therefore it does not satisfy the condition of being *purely outgoing*. Secondly, note that  $k$  is the undetermined in Eq. (9) and that this undetermined is complex (it corresponds to the energy of the possible resonances  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ ). We shall design to its real and imaginary parts as  $ak = u + iv$ ,  $u, v \in \mathbb{R}$ . Then, Eq. (9) changes to

$$e^{-2v} (\cos 2u + i \sin 2u) = \left(1 + \frac{\hbar^2 v}{am\gamma}\right) + i \left(\frac{-\hbar^2 u}{am\gamma}\right). \tag{10}$$

Splitting real and imaginary parts, we get

$$e^{-2v} \cos 2u = 1 + \frac{\hbar^2 v}{am\gamma}, \quad e^{-2v} \sin 2u = -\frac{\hbar^2 u}{am\gamma}. \tag{11}$$

Note that if  $v > 0$ ,  $e^{-2v} < 1$ , and then the absolute value of the left-hand side of the first equation in (11) is smaller than one although, at the same time, it turns out that the right-hand side of the same equation is bigger than one (because  $a, \gamma, m > 0$ ), which is absurd. As a consequence,  $v$  must be negative. The solutions of Eq. (11) are basically the real and imaginary parts of the solutions on the variable  $k$  of Eq. (9). These complex solutions should be considered as the resonances of the system determined by the Hamiltonian (1)–(2). At the first sight, we see that the number of resonances is infinite. This is shown by Fig. 1, in which we have chosen  $\hbar^2 = 2am\gamma$ . In fact the values for these constants are qualitatively irrelevant for our final results.



**Fig. 1.** Plot of the two families of curves in (11), the first one is given by the solid curves and the second one by the dashed curves. The coincidences of both families of curves (marked with dots) are precisely the infinite resonances of the Hamiltonian (1)–(2) (with the choice of units  $\hbar^2 = 2am\gamma$ ), obtained from the *purely outgoing boundary condition*  $D(u + iv) = 0$ .

Along the *purely outgoing boundary condition*, we could consider the *purely incoming boundary condition* defined as  $C(k) = 0$  and  $D(k) \neq 0$ . In this case, our system has an oncoming wave function without the outgoing wave function. Note that the condition  $C(k) = 0$  implies:

$$e^{-2ika} = 1 + \frac{i\hbar^2}{m\gamma}. \quad (12)$$

If we compare both equations in (8), we observe that if  $k$  is a solution of  $C(k) = 0$ , then,  $-k$  is a solution of  $D(k) = 0$ . Also, the  $S$  matrix is here given by  $S(k) = C(k)/D(k)$  [13], so that the poles of the  $S(k)$  matrix (resonances) are the zeroes of  $D(k)$ . Since  $D^*(k) = D(-k^*)$ , we have that if the complex value  $k$  represents a resonance so does  $-k^*$ . Note that  $-k^*$  is the symmetric point with respect to the  $y$  axis of  $k$ . Then, resonance poles appear in pairs. Note that in the present case the poles are simple. In fact, our poles are zeroes of the function  $f(k)$  in (9); the zeroes of  $f'(k)$  are quite easily obtained:

$$\begin{aligned} f'(k) &= 2iae^{2ika} + \frac{i\hbar^2}{m\gamma} = 0 \\ \implies k_n &= \frac{i}{2a} \{ \ln(2ma\gamma/\hbar^2) + i[\pi + 2\pi n] \}, \quad n \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (13)$$

Note that the real parts of these zeros have the form  $(2n+1)\pi/2a$ , which does not coincide with the real parts of the resonances (11). Therefore, the poles are simple.

### 3. The effect of a mass jump at $x = a$

Once we have discussed the calculation of resonances in the previous constant mass model, we shall add a new feature to it. Now, the mass will not be constant any more, but instead have a jump at the singular point  $x = a$ . This is the simplest model that combines a singular potential with a position dependent mass. The Hamiltonian is of the form of Eq. (1),  $H = K + V_0 + \gamma\delta(x - a)$ . The potential  $V_0$  is given by (2). The expression for  $K$  in (3) is too general. In fact, it was shown [10] that the choice  $\alpha = 0$ ,  $\beta = -1$  is compatible with Galilean invariance. This choice plus the condition

$$\frac{1}{m_2}\psi'(a+) - \frac{1}{m_1}\psi'(a-) = 0, \quad (14)$$

gives the following expression for  $K$

$$K := \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx^2}, & x < a, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx^2}, & x > a. \end{cases} \quad (15)$$

The proof is the following: let us choose  $\alpha = 0$ ,  $\beta = -1$  in Eq. (3), and let  $\psi(x)$  be a wavefunction with a finite jump at  $x = a$ . Then,

$$\begin{aligned} (K\psi)(x) &= p \frac{1}{2m(x)} p \psi(x) \\ &= -i\frac{\hbar}{2} p \left( \frac{1}{m_1} \Delta(a-x)\psi'(x) + \frac{1}{m_2} H(x-a)\psi'(x) \right) \\ &:= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \Phi(x) \end{aligned} \quad (16)$$

should be looked as a distribution, where  $\Delta(a-x)$  is the characteristic function of the interval  $[0, a]$  (which is one on this interval and zero otherwise) and  $H(x-a)$  the Heaviside step function. Note that, according to Eq. (4)

$$\frac{1}{m(x)} = \frac{1}{m_1} \Delta(a-x) + \frac{1}{m_2} H(x-a).$$

Then, let us apply (16) on an arbitrary test function  $\varphi(x)$ . This function is zero at  $x = 0$  and also at  $x = \infty$ . Thus, if  $(F|\varphi(x))$  is the action of the distribution  $F$  on the test function  $\varphi(x)$ :

$$\begin{aligned} (K\psi|\varphi(x)) &= \left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \Phi(x) \middle| \varphi(x) \right) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \Phi(x) \middle| \frac{d}{dx} \varphi(x) \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \varphi(a) \left[ -\frac{1}{m_1} \psi'(a-) + \frac{1}{m_2} \psi'(a+) \right] \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m_1} \Delta(a-x)\psi''(x) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{m_2} H(x-a)\psi''(x) \middle| \varphi(x) \right), \end{aligned} \quad (17)$$

where  $\Phi(x)$  has been defined in (16). Then, using Eq. (14) we conclude that

$$(K\psi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{1}{m_1} \Delta(a-x)\psi''(x) + \frac{1}{m_2} H(x-a)\psi''(x) \right], \quad (18)$$

which is equivalent to Eq. (15). Henceforth, we shall use the kinetic term  $K$  given in (15).

The next step is to find the matching conditions that the wave functions should fulfill in order that the Hamiltonian  $H$  be self-adjoint. Note that the singularity and the mass jump at  $x = a$  both suggest that wave functions, solutions of the Schrödinger equation for  $H$ , and their first derivatives should be discontinuous at  $x = a$ . Then, the Schrödinger equation becomes an equation in distributions, where it is necessary to define the product between the delta and a discontinuous function. This is [6]

$$\psi(x)\delta(x-a) = \frac{\psi(a+) + \psi(a-)}{2} \delta(x-a), \quad (19)$$

where  $\psi(a+)$ ,  $\psi(a-)$  are the right and left limits of  $\psi(x)$  at  $x = a$ , respectively. The function  $\psi(x)$  as solution of the Schrödinger equation associated to  $H$  should fulfill some regularity conditions.<sup>1</sup> If  $\varphi$  and  $\psi$  are two of such functions a simple calculation gives:

$$\langle \psi | H \varphi \rangle = \mathcal{G} + \langle H \psi | \varphi \rangle, \quad (20)$$

where

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= \frac{\hbar^2}{2m_2} [\psi^*(a+)\varphi'(a+) - \psi'^*(a+)\varphi(a+)] \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m_1} [\psi^*(a-)\varphi'(a-) - \psi'^*(a-)\varphi(a-)]. \end{aligned} \quad (21)$$

In order to find a domain on which  $H$  is self-adjoint, we have to give matching conditions at  $x = a$  for wave functions in this domain such that  $\mathcal{G} = 0$ , excluding the trivial case  $\psi(a+) = \psi(a-) = \psi'(a+) = \psi'(a-) = 0$ . Note that  $\mathcal{G}$  can be written in the following form:

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= (\psi^*(a+), \psi'^*(a+)) M_2 \begin{pmatrix} \varphi(a+) \\ \varphi'(a+) \end{pmatrix} \\ &\quad - (\psi^*(a-), \psi'^*(a-)) M_1 \begin{pmatrix} \varphi(a-) \\ \varphi'(a-) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (22)$$

<sup>1</sup> The wave functions  $\psi(x)$  must belong to the Sobolev space  $W_2^2(\mathbb{R}/\{0\})$  of continuous functions (except for a finite jump at the origin) from  $\mathbb{R}$  into  $\mathbb{C}$  such that: (i) any  $f \in W_2^2(\mathbb{R}/\{0\})$  admits a first continuous derivative (except at the origin), (ii) the second derivative exists almost everywhere, and (iii) both  $f \in W_2^2(\mathbb{R}/\{0\})$  and its second derivative are a.e. square integrable, so that

$$\int_{-\infty}^{\infty} \{ |f(x)|^2 + |f''(x)|^2 \} dx < \infty.$$



with

$$M_i := \frac{\hbar^2}{2m_i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \quad (23)$$

Using (22) and (23), the relation  $\mathcal{G} = 0$  can be written as

$$M_1 = T^\dagger M_2 T, \quad (24)$$

where  $T$  is the matrix that gives the boundary values to the right in terms of the boundary values to the left, i.e.,

$$\begin{pmatrix} \varphi(a+) \\ \varphi'(a+) \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \varphi(a-) \\ \varphi'(a-) \end{pmatrix}, \quad (25)$$

and  $T^\dagger$  is the adjoint matrix of  $T$ , i.e., the transpose and complex conjugate of  $T$ . The matrix  $T$  determines the matching conditions. The conclusion is that  $H$  is self-adjoint if and only if it acts on a subspace of functions such that their discontinuity at the origin is given by a matrix  $T$  as in (25) fulfilling the relation (24).

The next step is to give matching conditions at  $x = a$  such that the Hamiltonian  $H$  of this section be self-adjoint. Matching conditions (7) are the appropriate for the delta potential in the case of constant mass, so that a natural generalization for these matching conditions when the singular potential is accompanied with a mass jump, based mainly on the form of  $\mathcal{G}$  given in (21), is

$$\begin{aligned} \psi(a-) &= \psi(a+) = \psi(a), \\ \frac{1}{m_2} \psi'(a+) - \frac{1}{m_1} \psi'(a-) &= \frac{2\gamma}{\hbar^2} \psi(a). \end{aligned} \quad (26)$$

In fact, (26) generalizes (7) in the sense that both expressions coincide in the equal masses limit  $m_1 = m_2 = m$ .

Next, we have to check whether the Hamiltonian  $H$  on functions fulfilling (26) is self-adjoint. All we need is to show that (24) holds. Here,

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2m_2\gamma/\hbar^2 & m_2/m_1 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Clearly, (24) holds with  $T$  as in (27) and therefore (26) are good matching conditions in the sense that determine a domain of self-adjointness of  $H$ . Note that for  $\gamma = 0$ , we recover condition (14).

### 3.1. Resonances with mass jump

As in the previous section, we shall use the notation  $\psi_I(x)$  and  $\psi_{II}(x)$  to denote a solution of the Schrödinger equation in the regions  $0 < x < a$ , region I, and  $x > a$ , region II, respectively. With

this notation,  $\psi_I(a) = \psi(a-)$  and  $\psi_{II}(a) = \psi(a+)$  and the same for the derivatives. On the region I, i.e., in the segment  $[0, a]$ , the wave function is determined by the boundary values  $\psi_I(0) = 0$ ,  $\psi_I'(0) = 1$  and therefore,

$$\psi_I(x) = \frac{1}{k_1} \sin k_1 x, \quad (28)$$

with  $k_1 = \sqrt{2m_1 E/\hbar^2}$ . On the region II, i.e. in the half line  $[a, \infty)$ , the wave function is

$$\psi_{II}(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x}, \quad (29)$$

with  $k_2 = \sqrt{2m_2 E/\hbar^2}$ . If we use matching conditions (26), we obtain the following expressions for  $C$  and  $D$ :

$$\begin{aligned} C &= e^{-ik_2 a} \left[ \frac{1}{2} g(k_1) - \frac{im_2}{2k_2} h(k_1) \right], \\ D &= e^{ik_2 a} \left[ \frac{1}{2} g(k_1) + \frac{im_2}{2k_2} h(k_1) \right], \end{aligned} \quad (30)$$

with

$$g(k_1) = \frac{1}{k_1} \sin k_1 a, \quad h(k_1) = \frac{1}{m_1} \cos k_1 a + \frac{2\gamma}{k_1 \hbar^2} \sin k_1 a. \quad (31)$$

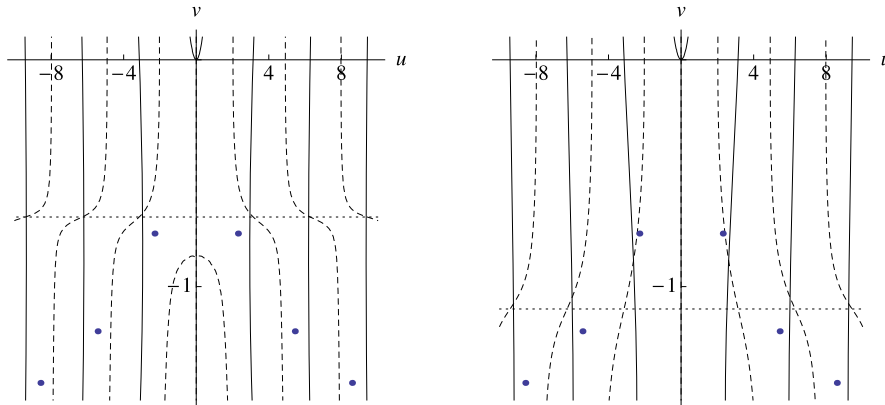
In the equal masses limit,  $m_1 = m_2 = m$ , the values of  $C$  and  $D$  in Eqs. (30)–(31) are identical to the values given in (8) respectively.

Purely outgoing boundary condition will give resonances. These conditions imply the existence of outgoing wave only, which means that  $D = 0$ . From (30) and (31), we observe that the only possible solutions should be complex. The expressions between brackets in (30) depends on both  $k_1$  and  $k_2$ . Then, using  $k_1 = (m_1/m_2)^{1/2} k_2$  and considering  $D = 0$  as an equation in  $k_1$ , from (30), we obtain that  $D^*(k_1) = D(-k_1^*)$ , which implies that if  $D(k_1) = 0$ , then,

$$[D(k_1)]^* = 0 \implies D(-k_1^*) = 0, \quad (32)$$

i.e., if the complex number  $k_1 = \sqrt{2m_1 E/\hbar^2}$  represents a resonance, so does  $-k_1^*$ . Let us write in the expression between the brackets for  $D$  in (30)  $k_2$  in terms of  $k_1$  and use  $k := k_1$  for simplicity. Clearly,  $k_2 = k\sqrt{m_2/m_1}$ . Then, from  $D = 0$  and using the second relation in (30) and (31), we get

$$k \sin ka + i \left[ \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} k \cos ka + \frac{2\gamma\sqrt{m_1 m_2}}{\hbar^2} \sin ka \right] = 0. \quad (33)$$



**Fig. 2.** Zeroes of the real part (solid curves) and the imaginary part (dashed curves) of Eq. (36) for two given values of  $\xi = \sqrt{m_2/m_1}$ :  $\xi = 0.6$  (left figure) and  $\xi = 0.8$  (right figure). Units are chosen so that  $\hbar^2 = 2\gamma am_1$ . In both cases, the intersection of solid and dashed curves provide the values of the corresponding resonances; the dots represent the values of the resonances for the case of equal masses ( $\xi = 1$ ). The horizontal dotted lines give the asymptotes where the resonances approach as their real parts grow to infinity:  $v_\infty = -0.6932$  for  $\xi = 0.6$  (left figure) and  $v_\infty = -1.0986$  for  $\xi = 0.8$  (right figure).

If we introduce the new variables  $z$  and  $\xi$ , defined as

$$z = ka, \quad m_2 = m_1 \xi^2, \quad \xi > 0, \tag{34}$$

and we multiply Eq. (33) by  $a$ , then it can be expressed as:

$$z \sin z + i \left[ \xi z \cos z + \frac{2\gamma am_1}{\hbar^2} \xi \sin z \right] = 0. \tag{35}$$

Solutions in  $z = u + iv$  of Eq. (35) are the resonances of our model, being  $u$  and  $v$  the real and imaginary parts of those resonances. If units are chosen now in such a way that  $\hbar^2 = 2\gamma am_1$ , Eq. (35) is simplified and can be written as

$$(z + i\xi) \sin z + i\xi z \cos z = 0. \tag{36}$$

In Figs. 2, 3 and 4, we plot the zeroes of the real part of (36) (solid curves) and the zeroes of its imaginary part (dashed curves) for different values of  $\xi = \sqrt{m_2/m_1}$ . Thus, intersections of solid and dashed lines represent resonances. Again as in the case of equal masses ( $\xi = 1$ ),  $k = 0$  represent a spurious solution which appears because we have obtained (33) and hence (36) after multiplying  $D$  in (30) by  $k^2$ .

From the analysis of these figures, one can guess that the dependence of the resonances on the parameter  $\xi$  is analytic, with imaginary parts that decrease as  $\xi$  departs from the equal masses case,  $\xi = 1$ . In the cases  $\xi < 1$  shown in Fig. 2, one also has the impression that as the real part of the resonances goes to infinity,

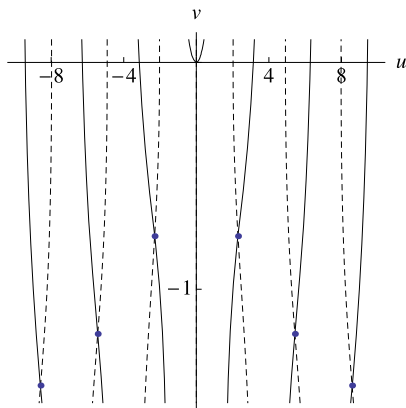


Fig. 3. Zeroes of the real part (solid curves) and the imaginary part (dashed curves) of Eq. (36) for  $\xi = \sqrt{m_2/m_1} = 1$ . The intersection of the solid and dashed curves provide the value of the resonances, here showed as dots. These resonances coincide with those given in Fig. 1. Units are chosen as  $\hbar^2 = 2\gamma am_1$ .

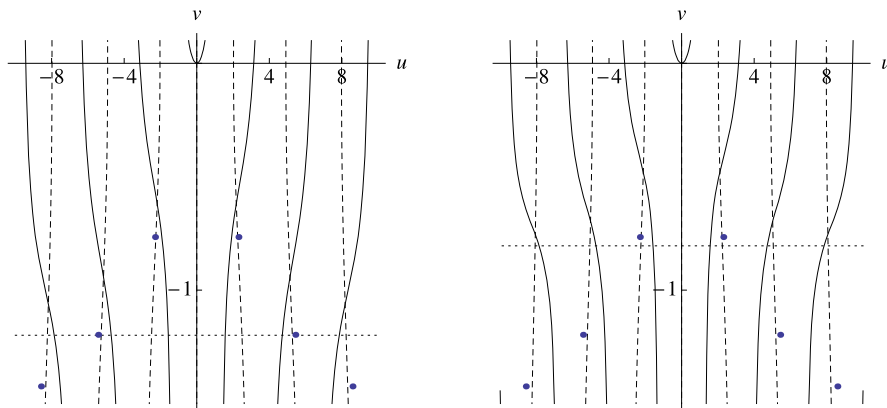


Fig. 4. Zeroes of the real part (solid curves) and the imaginary part (dashed curves) of Eq. (36) for two given values of  $\xi = \sqrt{m_2/m_1}$ :  $\xi = 1.2$  (left figure) and  $\xi = 1.5$  (right figure). Units are chosen so that  $\hbar^2 = 2\gamma am_1$ . In both cases, the intersection of solid and dashed curves give the values of the corresponding resonances; the dots represent the values of the resonances for the case of equal masses ( $\xi = 1$ ). The horizontal dotted lines give the asymptotes where the resonances approach as their real parts grow to infinity:  $v_\infty = -1.1990$  for  $\xi = 1.2$  (left figure) and  $v_\infty = -0.8047$  for  $\xi = 1.5$  (right figure).

the corresponding imaginary parts goes to a finite value. A similar behavior can be observed for  $\xi > 1$  (see Fig. 4). On the contrary, this does not happen for constant mass,  $\xi = 1$ . This fact can be verified as follows: let us write explicitly the real and imaginary parts of the key equation (36) in terms of  $z = u + iv$ . After some algebra, we find the following couple of equations that have to be satisfied:

$$u \tan u = \frac{v(\xi + \tanh v) + \xi}{1 + \xi \tanh v},$$

$$\frac{\tan u}{u} = -\frac{\xi + \tanh v}{v(1 + \xi \tanh v) + \xi}. \tag{37}$$

When we analyze the existence of solutions of the system (37) we see that  $v$  goes to a finite value  $v_\infty$  as  $u \rightarrow \infty$ , which is given by

$$v_\infty = -\operatorname{arctanh} \xi \quad \text{if } \xi \in (0, 1),$$

$$v_\infty = -\operatorname{arctanh}(1/\xi) \quad \text{if } \xi \in (1, \infty). \tag{38}$$

When  $\xi = 1$ ,  $v_\infty = -\infty$ . These results confirm our guess.

### 3.2. Search for double and multiple pole resonances

A resonance of order  $n$  is given by a pole of  $n$ -th order of the  $S$ -matrix or, equivalently, by a zero of  $n$ -th order of  $D(k)$  ( $k_0$  is a zero of  $n$ -th order of  $D(k)$  if  $D(k_0) = D'(k_0) = \dots = D^{(n-1)}(k_0) = 0$  and  $D^{(n)}(k_0) \neq 0$ ). Resonances of order  $n \geq 2$  are called multiple pole resonances or degenerate resonances [3,9]. Note that a necessary condition for  $k_0$  to be a multiple pole resonance is  $D(k_0) = D'(k_0) = 0$ , so that if this condition is not fulfilled,  $k_0$  cannot be a degenerate resonance of any order.

Therefore, in the case we are studying, in order to obtain the double pole or multiple resonances, if they existed, we first need to derive (36) with respect to  $k$  and then write the result equal to zero. A simple calculation gives:

$$(1 - i\xi z) \sin z + (z + 2i\xi) \cos z = 0. \tag{39}$$

Hence, if multiple pole resonances existed, these poles would be given by complex numbers  $z$  that have to be solutions of (36) and (39) simultaneously. A short calculation shows that the necessary condition for this to happen becomes that  $z$  satisfy the following quadratic equation

$$(1 - \xi^2)z^2 + 2i\xi z - 2\xi^2 = 0. \tag{40}$$

An straightforward analysis show that the two solutions of this equation,  $z_{\pm}(\xi)$ , do not satisfy neither (36) nor (39), and cannot be double pole resonances. Therefore, the conclusion is that a jump of mass along a delta barrier never has the effect of a double delta barrier [9] in the sense that it does not produce degenerate resonances.

#### 4. Concluding remarks

We have studied a one-dimensional system with a hard core at the origin, a repulsive Dirac delta potential at  $x = a > 0$  plus a mass jump at the point  $x = a$ . We have given the simplest form of the Hamiltonian  $H$  and its domain so that  $H$  is self-adjoint. We have shown that this system has an infinite number of resonances and have located them. Resonances are poles of the scattering matrix and these poles are simple in our model (no degenerate resonances exist). Contrarily to the usual case of constant mass, the imaginary part of these resonance poles tend toward a limit value if a mass jump exist.

In a next paper, we shall introduce a mass discontinuity in a similar model having two Dirac delta barriers. This model allows for degenerate resonances at given values of certain parameters. It is interesting to study the effect of variable mass on these degenerate resonances.

#### Acknowledgements

Partial financial support is acknowledged to the Spanish Ministerio de Educación y Ciencia (Project MTM2009-10751) and Junta de Castilla y León (Excellence Project GR224).

#### References

- [1] K.O. Friedrichs, *Commun. Pure Appl. Math.* 1 (1948) 361.
- [2] I.E. Antoniou, et al., *Chaos Solitons Fractals* 12 (2001) 2757; I.E. Antoniou, et al., *J. Phys. A: Math. Gen.* 36 (2003) 12109.
- [3] I.E. Antoniou, M. Gadella, G.P. Pronko, *J. Math. Phys.* 39 (1998) 2459.
- [4] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, H. Holden, *Solvable Models in Quantum Mechanics*, Springer, Berlin, 1988.
- [5] S. Albeverio, P. Kurasov, *Singular Perturbations of Differential Operators*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999.
- [6] P. Kurasov, *J. Math. Anal. Appl.* 201 (1996) 297.
- [7] P. Seba, *Rep. Math. Phys.* 24 (1986) 111; F.A.B. Coutinho, Y. Nogami, J. Fernando Pérez, *J. Phys. A: Math. Gen.* 30 (1997) 3937; P.L. Christiansen, H.C. Arnbak, A.V. Zolotaryuk, V.N. Ermakov, Y.B. Gaididei, *J. Phys. A: Math. Gen.* 36 (2003) 7589; F.M. Toyama, Y. Nogami, *J. Phys. A: Math. Theor.* 40 (2007) F685; S. Albeverio, L. Dabrowski, P. Kurasov, *Lett. Math. Phys.* 45 (1998) 33; T. Fülöp, I. Tsutsui, *Phys. Lett. A* 264 (2000) 366; P. Hejčík, T. Cheon, *Phys. Lett. A* 356 (2006) 290.
- [8] C. Fernández, G. Palma, H. Prado, *J. Phys. A: Math. Gen.* 38 (2005) 7509.
- [9] E. Hernández, A. Jáuregui, A. Mondragón, *J. Phys. A: Math. Gen.* 33 (2000) 4507; I.E. Antoniou, et al., *Chaos Solitons Fractals* 12 (2001) 2719; E. Hernández, A. Jáuregui, A. Mondragón, *Phys. Rev. E* 67 (2003) 022721; E. Hernández, A. Jáuregui, A. Mondragón, *Phys. Rev. E* 72 (2005) 026221.
- [10] J.-M. Lévy-Leblond, *Phys. Rev. A* 52 (1995) 1845.
- [11] N. Moiseyev, R. Lefebvre, *Phys. Rev. A* 64 (2001) 052711; S. Cruz y Cruz, J. Negro, L.M. Nieto, *Phys. Lett. A* 369 (2007) 400; A. Ganguly, L.M. Nieto, *J. Phys. A: Math. Theor.* 40 (2007) 7265; A. Ganguly, S. Kuru, J. Negro, L.M. Nieto, *Phys. Lett. A* 360 (2006) 228; A. Ganguly, M.V. Ioffe, L.M. Nieto, *J. Phys. A: Math. Gen.* 39 (2006) 14659; M. Gadella, S. Kuru, J. Negro, *Phys. Lett. A* 362 (2007) 265.
- [12] R.A. Morrow, K.R. Brownstein, *Phys. Rev. B* 30 (1984) 678; G.T. Einevoll, P.C. Hemmer, *J. Phys. C* 21 (1988) L1193; J. Thomsen, G.T. Einevoll, P.C. Hemmer, *Phys. Rev. B* 39 (1989) 12783; G.T. Einevoll, P.C. Hemmer, *J. Thomsen, Phys. Rev. B* 42 (1990) 3485.
- [13] L.J. Boya, *Riv. Nuovo Cimento* 31 (2008) 75.



# Apéndice B

## Artículo 2

**J.J. Alvarez**, M. Gadella, L.M. Nieto,

*A study of resonances in a one dimensional model with singular Hamiltonian and mass jump,*

International Journal of Theoretical Physics, **50**, 2161-2169 (2011)

# A Study of Resonances in a One-Dimensional Model with Singular Hamiltonian and Mass Jumps

J.J. Álvarez · M. Gadella · L.M. Nieto

Received: 12 October 2010 / Accepted: 20 December 2010 / Published online: 8 January 2011  
© Springer Science+Business Media, LLC 2011

**Abstract** We study the resonances produced in a one dimensional quantum system with an infinite potential on the negative real line plus two Dirac delta barriers centered at the points  $a, b > 0$ . The system mass is not constant but undergoes jumps at the singular points  $a$  and  $b$  of the potential. We study the behavior of the resonances under the change of parameters such that the weight of the deltas or the heights of mass jumps. Possible degeneration of these resonances is also considered.

**Keywords** Quantum systems with variable mass · Singular Potentials

## 1 Introduction

This paper is devoted to a particular case of one dimensional Hamiltonians with singular potentials. This kind of Hamiltonians have received a lot of attention because of their interest in construction exactly solvable models [1–11]. Independently, systems with variable mass have lately acquired some attention in the literature [12–22]. The simplest one dimensional systems with variable mass are those in which the mass is constant except for a discontinuity or jump at a given point. This kind of abrupt discontinuity is interesting from the physics point of view since it can be used to represent an abrupt heterojunction between two different materials [12–15].

---

J.J. Álvarez (✉)  
E.U. de Informática de Segovia, 40005, Segovia, Spain  
e-mail: [jjalvarez@infor.uva.es](mailto:jjalvarez@infor.uva.es)

M. Gadella · L.M. Nieto  
Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica, Universidad de Valladolid, 47071 Valladolid, Spain

M. Gadella  
e-mail: [manuelgadella1@gmail.com](mailto:manuelgadella1@gmail.com)

L.M. Nieto  
e-mail: [luismi@metodos.fam.cie.uva.es](mailto:luismi@metodos.fam.cie.uva.es)

In the present example, we study a one dimensional system with an impenetrable barrier at the origin and an interaction in the form of one or two Dirac deltas. At the points supporting the deltas the mass is discontinuous and undergoes a jump, it is constant at any other point. The purpose of this article is to discuss the resonance phenomena produced by this kind of systems.

Thus, the studied system has an unperturbed Hamiltonian  $H_0$  plus a singular potential. Its most general form is

$$H_0 = K + V_0 = \frac{1}{2}m^\alpha(x)pm^\beta(x)pm^\alpha(x) + V_0(x), \quad (1)$$

with  $2\alpha + \beta = -1$ . In the most general case  $m(x)$  gives an arbitrary function of the mass with the position. Therefore,  $m(x)$  is an operator which in general does not commute with the momentum  $p$ . In this paper, we shall use some particular form of  $m(x)$  as well as a particular choice of  $\alpha$  and  $\beta$ . Also,

$$V_0(x) := \begin{cases} \infty & \text{if } x \leq 0, \\ 0 & \text{if } x > 0, \end{cases} \quad (2)$$

which defines an impenetrable barrier (hard core) supported on the negative semiaxis. The kinetic term  $K$  is defined by (1) in an obvious manner and contains all the information on the behavior of mass. The total Hamiltonian will be of the form  $H = H_0 + V$ , where  $V$  includes the singular part of the potential. This will be introduced later.

This paper is organized as follows: in Sect. 2, we summarize the results in the case of one delta barrier and one mass jump. The case of two deltas and two jumps is discussed in Sect. 3, along some ideas concerning possible generalizations to systems with more deltas and mass jumps. The article is closed with some concluding remarks.

## 2 One Dirac Delta with a Mass Jump at $x = a$

The simplest system of the type discussed in the Introduction includes one delta barrier supported at the point  $x = a > 0$  plus a mass jump at the same point. This system, which has been already introduced in [23], is essential for any further generalization, including the case of two deltas with mass jumps located at the same points to be studied in the next section. In addition, its inclusion here makes the present article self contained. Then, let us first consider the Hamiltonian  $H_0$  as in (1) with a mass jump at the point  $a > 0$ . Since, we have an impenetrable barrier at the origin, the function of mass  $m(x)$  can be written in the following form:

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & \text{if } 0 < x < a, \\ m_2 & \text{if } x > a. \end{cases} \quad (3)$$

We have seen that the kinetic term  $K$  in (1) depends on the parameter  $\alpha$  (note that if we determine  $\alpha$ ,  $\beta$  is automatically determined). Among all possible choices,  $\alpha = 0$  and  $\beta = -1$  is the most natural and, in addition, it has been proven that it is Galilei invariant [16]. If moreover, we add on the wave functions the additional condition

$$\frac{1}{m_2}\psi'(a+) - \frac{1}{m_1}\psi'(a-) = 0, \quad (4)$$

we conclude [23] that the kinetic term  $K$  has the form:

$$K := \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx^2}, & x < a, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx^2}, & x > a. \end{cases} \tag{5}$$

The self adjointness of (5) was discussed in [22]. A discussion on the self adjointness of  $K$  with mass jump and arbitrary values of  $\alpha$  can be carried out analogously.

Next, we shall add to  $H_0$  a delta at  $x = a$ , so that the total Hamiltonian is now given by

$$H = H_0 + \gamma\delta(x - a), \quad a > 0, \tag{6}$$

with  $H_0$  as in (1). We know that singular potentials are defined through the theory of extensions of symmetric operators with equal deficiency indices. A discussion on the introduction of the term  $\gamma\delta(x - a)$  is relevant here, both by its own interest and because it should be generalized to wider situations. This discussion will be presented in the next subsection.

### 2.1 Self Adjoint Determination of $H$ Through Matching Conditions

In order to define the Hamiltonian (6), we need to find a domain in which  $H_0$  be symmetric with equal deficiency indices, in our case these are  $(2, 2)$ . Then, we extend the domain to a subspace of wave functions that satisfy some matching conditions at the point  $x = a$ . This has been done in [23] and we give here a brief summary of this procedure. If  $\varphi(x)$  is a wave function and  $\varphi(a+)$  and  $\varphi(a-)$  its boundary values to the right and to the left at  $x = a$  respectively, these matching conditions are determined by a  $2 \times 2$  matrix  $\mathcal{T}$  such as

$$\begin{pmatrix} \varphi(a+) \\ \varphi'(a+) \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} \varphi(a-) \\ \varphi'(a-) \end{pmatrix}, \tag{7}$$

where the prime denotes derivative with respect  $x$ . Matching conditions that determine self adjoint extensions of  $H_0$  are given by matrices  $\mathcal{T}$  satisfying the following relation:

$$M_1 = \mathcal{T}^\dagger M_2 \mathcal{T}, \tag{8}$$

where,

$$M_i := \frac{\hbar^2}{2m_i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \tag{9}$$

The matching conditions that determine the Hamiltonian  $H$  in (6) are

$$\psi(a-) = \psi(a+) = \psi(a), \quad \frac{1}{m_2} \psi'(a+) - \frac{1}{m_1} \psi'(a-) = \frac{2\gamma}{\hbar^2} \psi(a). \tag{10}$$

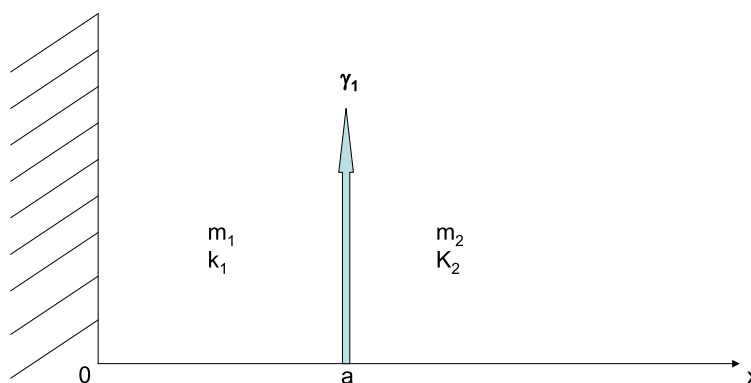
The matrix  $\mathcal{T}$  providing these matching conditions as in (7) is

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{2m_2\gamma}{\hbar^2} & \frac{m_2}{m_1} \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Matching conditions (9) are the minimal generalization that gives the matching conditions for the Dirac delta potential supported at  $x = a$  without mass discontinuity.



**Fig. 1** Potential with one Delta centered at the point  $x = a$



### 2.2 The Search for Resonances

Take the Hamiltonian  $H$  in (6). The form of the potential is depicted in Fig. 1. Note that the delta splits the positive semiaxis into two regions that we denote as  $I$  for  $0 < x < a$  and  $II$  for  $x > a$

Solutions of the Schrödinger equation associated to  $H$  are then labeled as  $\psi_I(x)$  and  $\psi_{II}(x)$  in  $I$  and  $II$ , respectively. With the standard condition at the origin given by  $\psi_I(0) = 0$  and  $\psi'_I(0) = 1$ , these solutions are given by

$$\psi_I(x) = \frac{1}{k_1} \sin k_1 x, \quad \psi_{II}(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x}. \tag{12}$$

Constants  $C$  and  $D$  are determined via matching conditions (10). This gives:

$$C = e^{-ik_2 a} \left[ \frac{1}{2} g(k_1) - \frac{im_2}{2k_2} h(k_1) \right], \quad D = e^{ik_2 a} \left[ \frac{1}{2} g(k_1) + \frac{im_2}{2k_2} h(k_1) \right] \tag{13}$$

where  $g(k_1)$  and  $h(k_1)$  are defined as follows

$$g(k_1) = \frac{1}{k_1} \sin k_1 a, \quad h(k_1) = \frac{1}{m_1} \cos k_1 a + \frac{2\gamma}{k_1 \hbar^2} \sin k_1 a. \tag{14}$$

In order to find the resonances for this system, we shall use the well known *Purely Outgoing Boundary Conditions*. These conditions assume the existence of an outgoing wave only, so that the annihilation of the incoming wave gives a transcendent equation whose solutions give the resonance poles. These solutions coincide with the poles of the scattering function (also called scattering matrix) [24–28]. This gives the equation  $D = 0$ , where  $D$  has been defined in (13). Note that  $D$  is the Jost function and that  $k_{1,2}$  in (13) are given by  $k_1 = \sqrt{2m_1 E/\hbar^2}$  and  $k_2 = \sqrt{2m_2 E/\hbar^2}$ . This gives  $k_2 = (m_2/m_1)^{1/2} k_1$ . Then, if we define  $k := k_1$ ,  $z := ka$ , and  $\xi^2 := m_2/m_1$ ,  $\xi > 0$ , equation  $D = 0$  has this final form

$$z \sin z + i \left[ \xi z \cos z + \frac{2\gamma a m_1}{\hbar^2} \xi \sin z \right] = 0. \tag{15}$$

Thus, resonances in the representation of momentum are given by the solutions in  $z$  of this transcendental equation. This problem has been solved in [23]. Also, resonances are given as simple zeroes of  $D$  as no zeroes of higher order exist. There exist an infinite number of resonances but no degenerate resonances (given by higher order poles of the scattering function or zeroes of the Jost function) exist.

### 3 The Case of Two Deltas with a Mass Jump

Once we have solved the problem of finding the resonances of the previous model, we may investigate the situation in which more than one delta is present in the potential. In addition, we consider respective mass jumps at the points supporting the deltas. Thus, if the singular potential is given by  $\gamma_1\delta(x - a_1) + \gamma_2\delta(x - a_2) + \dots + \gamma_n\delta(x - a_n)$ , the function of the mass  $m(x)$ , should be given by,

$$m(x) := \begin{cases} m_1 & \text{if } 0 < x < a_1, \\ m_2 & \text{if } a_1 < x < a_2, \\ \dots & \dots \dots, \\ m_{n+1} & \text{if } a_n < x. \end{cases} \tag{16}$$

The generalization of the kinetic term  $K$  as in (5) to this situation is obvious. Now, in order to obtain the self adjoint Hamiltonian with the proposed singular potential, we need to determine matching conditions at all points in the sequence  $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ . This matching conditions will be given by matrix relations, so that if  $\psi(x)$  is a wave function on the domain of self adjointness of  $H$ , it should fulfill at each  $a_i, i = 1, 2, \dots, n$  the following relation:

$$\begin{pmatrix} \psi_{i+1}(a_i) \\ \psi'_{i+1}(a_i) \end{pmatrix} = \mathcal{T}_i(a_i) \begin{pmatrix} \psi_i(a_i) \\ \psi'_i(a_i) \end{pmatrix}, \tag{17}$$

were we have denoted by  $\psi_i(x)$  the solution of the Schrödinger equation between  $a_{i-1}$  and  $a_i, a_0 = 0$ . Note that  $\psi_i(x) = C_i e^{ik_i x} + D_i e^{-ik_i x}$ , where  $k_i = \sqrt{2m_i E/\hbar^2}$ . Then,

$$\begin{pmatrix} \psi_i(a_i) \\ \psi'_i(a_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_i a_i} & e^{-ik_i a_i} \\ ik_i e^{ik_i a_i} & -ik_i e^{-ik_i a_i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_i \\ D_i \end{pmatrix} = \mathcal{M}_i(a_i) \begin{pmatrix} C_i \\ D_i \end{pmatrix}. \tag{18}$$

The matrices  $\mathcal{M}_i(a_i)$  are defined in (18). With the help of (18) and (17), we can derive the following recurrence relation:

$$\begin{pmatrix} C_{i+1} \\ D_{i+1} \end{pmatrix} = \mathcal{M}_i^{-1}(a_i)\mathcal{T}_i(a_i)\mathcal{M}_i(a_i) \begin{pmatrix} C_i \\ D_i \end{pmatrix}. \tag{19}$$

The matrices,  $\mathcal{T}_i(a_i)$  have the following form:

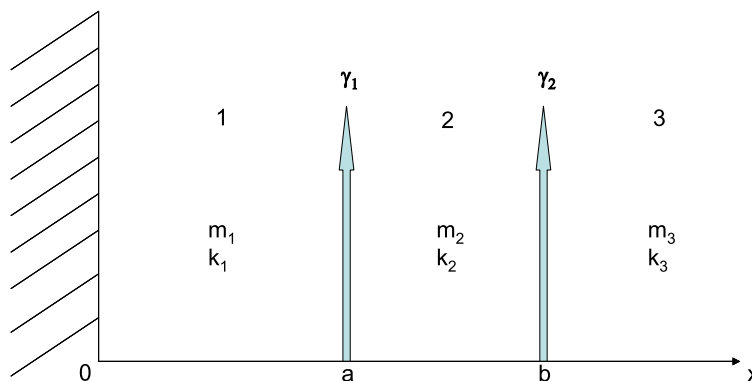
$$\mathcal{T}_i := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \gamma_i m_{i+1} & \frac{m_{i+1}}{m_i} \end{pmatrix}. \tag{20}$$

The simplest case with  $n \neq 1$  is  $n = 2$ . Then, we have two deltas and their respective mass jumps. The half line  $x > 0$  is divided into three regions (Fig. 2).

The wave function in each region is given by  $\psi_i(x) = C_i e^{ik_i x} + D_i e^{-ik_i x}$  with  $i = 1, 2, 3$ . The relation among the coefficients  $C_1, D_1$  and  $C_3, D_3$  is

$$\begin{pmatrix} C_3 \\ D_3 \end{pmatrix} = (\mathcal{M}_3^{-1}(a_2)\mathcal{T}_2(a_2)\mathcal{M}_2(a_2))(\mathcal{M}_2^{-1}(a_1)\mathcal{T}_1(a_1)\mathcal{M}_1(a_1)) \begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix} \tag{21}$$

**Fig. 2** Potential with two Deltas centered at the points  $x = a$  and  $x = b$



where,

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2ik} \\ -\frac{1}{2ik} \end{pmatrix} \tag{22}$$

are the initial conditions.

### 3.1 Searching for Resonances

As was done in the previous case, we shall find resonances for the model with two deltas by imposing the purely outgoing boundary conditions or the annulation of the Jost function, which is  $D_3$  in our case. As was established in (21), in order to obtain  $D_3$ , we have to construct the following matrices:

$$\mathcal{M}_3^{-1} \cdot \mathcal{T}_2 \cdot \mathcal{M}_2 = \begin{pmatrix} \frac{e^{-i(1+q)z(\eta-\xi)}(ak\eta+(z-ir\eta)\xi)}{2z\xi} & \frac{e^{-i(1+q)z(\eta+\xi)}(-ak\eta+(z-ir\eta)\xi)}{2z\xi} \\ \frac{e^{i(1+q)z(\eta+\xi)}(-ak\eta+(z+ir\eta)\xi)}{2z\xi} & \frac{e^{i(1+q)z(\eta-\xi)}(ak\eta+(z+ir\eta)\xi)}{2z\xi} \end{pmatrix} \tag{23}$$

and

$$\mathcal{M}_2^{-1} \cdot \mathcal{T}_1 \cdot \mathcal{M}_1 = \begin{pmatrix} \frac{e^{-iz(-1+\xi+q\xi)}(z-i\xi+z\xi)}{2z} & \frac{e^{-iz(1+\xi+q\xi)}(z-i\xi-z\xi)}{2z} \\ \frac{e^{iz(1+\xi+q\xi)}(z+i\xi-z\xi)}{2z} & \frac{e^{iz(-1+\xi+q\xi)}(z+i\xi+z\xi)}{2z} \end{pmatrix}. \tag{24}$$

The explicit for of  $D_3$  comes out the last four equations and is

$$D_3 = \frac{ae^{i(1+q)z\eta\xi}}{2z^2} \left( \cos(qz\xi)\{[z+i(1+r)\eta\xi]\sin z + iz\eta\xi\cos z\} + \sin(qz\xi)\left\{\left[\xi+i\left(\frac{r\eta\xi^2}{z}-z\eta\right)\right]\sin z + [z\xi+ir\eta\xi^2]\cos z\right\} \right), \tag{25}$$

with  $k_1 := k, z := ka, m_2 := m_1\xi^2, m_3 := m_1\eta^2, q := \frac{b-a}{a}, k_2 := \xi k, k_3 := \eta k$ .

In the limit of equal masses ( $m_1 = m_2 \iff \eta = \xi = 1$ ), the above expression (25) for  $D_3$  becomes

$$D_3 = \frac{ae^{i(1+q)z}}{2z^2} \left( \cos(qz)\{[z+i(1+r)]\sin z + iz\cos z\} + \sin(qz)\left\{\left[1+i\left(\frac{r}{z}-z\right)\right]\sin z + [z+ir]\cos z\right\} \right). \tag{26}$$

As we said, the search for resonances is the search for solutions of the equation  $D_3 = 0$ . In the case of equal masses, Mondragón and coworkers [25–28] have proven the existence of double resonances, i.e., resonances described by means of double zeroes of the Jost function (or equivalently by double poles of the scattering function). Therefore, we also expect the existence of double resonances when the deltas are accompanied with mass jumps. Then, we shall devote the remainder of this paper to the search for this double resonances. Assume that  $z_0$  is a double resonance. It must fulfill the following conditions:

$$D_3(z_0) = 0, \quad \frac{dD_3(z_0)}{dz} = 0, \quad \frac{d^2D_3(z_0)}{dz^2} \neq 0. \tag{27}$$

Now with the help of (25), we see that equations  $D_3(z) = 0$  and  $D'(z) = 0$  have the same structure. In fact,  $D_3(z) = 0$  can be written as

$$F_1(z, \xi, \eta, r) \cos(qz\xi) + F_2(z, \xi, \eta, r) \sin(qz\xi) = 0 \tag{28}$$

and  $D'(z) = 0$  as

$$F_3(z, \xi, \eta, r) \cos(qz\xi) + F_4(z, \xi, \eta, r) \sin(qz\xi) = 0, \tag{29}$$

where the functions  $F_i, i = 1, 2, 3, 4$  all depend on the variable  $z$  and on the parameters  $\xi, \eta, r$ . Double resonances are the solutions in  $z$  of the transcendental system given by equations (28)–(29). By expressing  $\tan(\xi, \eta, r)$  (or  $\cot(\xi, \eta, r)$ ) in terms of  $F_i$  in both (28)–(29), we obtain

$$F_1F_4 - F_2F_3 = 0. \tag{30}$$

Conversely, if (30) and one of (28)–(29) are satisfied, then the other is satisfied. Therefore, double poles are solutions of (30) and one of (28)–(29). Our strategy is then, solving the transcendent equation (30) and then, checking which of its solutions are solutions of one of the equations (28)–(29). It is a fact that solutions of (30) satisfy both (28)–(29).

The desired solutions are found with the help of the Mathematica software. First, one finds that (30) can be rewritten as

$$\cot(z) - \frac{f_1(z, q, \xi, \eta, r) \pm \sqrt{f_2(z, q, \xi, \eta, r)}}{f_3(z, q, \xi, \eta, r)} = 0, \tag{31}$$

with

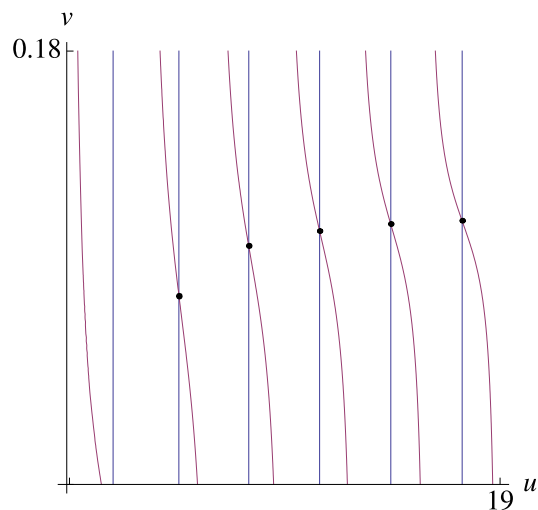
$$f_1(z, q, \xi, \eta, r) = -\xi^2(r\eta^2 + q(z^2(-1 + \eta^2) - 2irz\eta\xi + r^2\eta^2\xi^2)), \tag{32}$$

$$\begin{aligned} f_2(z, q, \xi, \eta, r) = & \xi^4(r\eta^2 + q((z^2(-1 + \eta^2) - 2irz\eta\xi + r^2\eta^2\xi^2))^2 \\ & - (z^2(-1 + \eta^2)(1 + q\xi^2) - 2irz\eta\xi(1 + q\xi^2) \\ & + r\eta^2\xi^2(1 + r + qr\xi^2))((1 + q)z^4(-1 + \eta^2) \\ & - 2i(1 + q)rz^3\eta\xi - 2irz\eta\xi(1 + q\xi^2) + r\eta^2\xi^2(1 + r + qr\xi^2) \\ & + z^2(-1 - q\xi^2 + \eta^2(1 + r + q\xi^2 + (1 + q)r^2\xi^2))) \end{aligned} \tag{33}$$

and

$$f_3(z, q, \xi, \eta, r) = z(z^2(-1 + \eta^2)(1 + q\xi^2) - 2irz\eta\xi(1 + q\xi^2) + r\eta^2\xi^2(1 + r + qr\xi^2)). \tag{34}$$

**Fig. 3** Double resonances for  $r = 3$ ,  $q = 5$ ,  $\eta = 4$  and  $\xi = 7$  with an accuracy of  $10^{-8}$



Solutions of equation (31) with (32)–(34) are depicted in Fig. 3, with  $z = u + iv$  ( $u$  and  $v$  real functions depending on  $r$ ,  $q$ ,  $\eta$  and  $\xi$  parameters).

We want to underline that they are solutions of (30) but also of (28)–(29) and therefore, they give all double poles of the model under consideration. With this procedure, we have shown that these solutions are *at least* double resonances, but they may be in principle of a higher order. This is not the case, as we have seen that, for any double resonance located at the point  $z_0$ ,  $D_3''(z_0) \neq 0$ , i.e., the second derivative of the Jost function at  $z_0$  cannot vanish. This is true no matter on the chosen value of the parameters. The trivial solution  $z = 0$  exists, although it has no physical meaning.

#### 4 Concluding Remarks

We have proposed a quantum one dimensional resonant model in which we combine singular potentials with a discontinuity on the mass. The model has an impenetrable barrier supported by the negative half line, so that it can be looked as the restriction to zero angular momentum of a spherically symmetric three dimensional model. We assume that the mass is a function of the position with abrupt discontinuities on some points but constant elsewhere. The points at which the mass discontinuities occur support Dirac delta barriers.

We have analyzed the cases with one and two delta barriers. The one barrier case settle the basis for the study of further generalizations, it presents resonances, but these resonances are not degenerated in the sense that are simple poles of the scattering matrix. The two barrier case shows the existence of double resonances but not of triple resonances. This result suggest that the presence of  $N$  barriers may show the existence of degenerate resonances of orders up to  $N$ , but not degenerate resonances of order higher than  $N$ .

**Acknowledgements** Partial financial support is acknowledged to the Spanish Junta de Castilla y León (Project GR224) and the Ministry of Science and Innovation (Projects MTM2009-10751 and FPA2008-04772-E).

#### References

1. Albeverio, S., Gesztesy, F., Hoegh-Krohn, R., Holden, H.: Solvable Models in Quantum Mechanics. Springer, Berlin (1988)

2. Alveberio, S., Kurasov, P.: *Singular Perturbations of Differential Operators*. Cambridge University Press, Cambridge (1999)
3. Kurasov, P.: *J. Math. Anal. Appl.* **201**, 297 (1996)
4. Seba, P.: *Rep. Math. Phys.* **24**, 111 (1986)
5. Coutinho, F.A.B., Nogami, Y., Pérez, J. Fernando: *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 3937 (1997)
6. Christiansen, P.L., Arnbak, H.C., Zolotaryuk, A.V., Ermakov, V.N., Gaididei, Y.B.: *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 7589 (2003)
7. Toyama, F.M., Nogami, Y.: *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, F685 (2007)
8. Alveberio, S., Dabrowski, L., Kurasov, P.: *Lett. Math. Phys.* **45**, 33 (1998)
9. Fülöp, T., Tsutsui, I.: *Phys. Lett. A* **264**, 366 (2000)
10. Hejcik, P., Cheon, T.: *Phys. Lett. A* **356**, 290 (2006)
11. Fernández, C., Palma, G., Prado, H.: *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 7509 (2005)
12. Morrow, R.A., Brownstein, K.R.: *Phys. Rev. B* **30**, 678 (1984)
13. Einevoll, G.T., Hemmer, P.C.: *J. Phys. C* **21**, L1193 (1988)
14. Thomsen, J., Einevoll, G.T., Hemmer, P.C.: *Phys. Rev. B* **39**, 12783 (1989)
15. Einevoll, G.T., Hemmer, P.C., Thomsen, J.: *Phys. Rev. B* **42**, 3485 (1990)
16. Lévy-Leblond, J.-M.: *Phys. Rev. A* **52**, 1845 (1995)
17. Moiseyev, N., Lefebvre, R.: *Phys. Rev. A* **64**, 052711 (2001)
18. Cruz y Cruz, S., Negro, J., Nieto, L.M.: *Phys. Lett. A* **369**, 400 (2007)
19. Ganguly, A., Nieto, L.M.: *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, 7265 (2007)
20. Ganguly, A., Kuru, S., Negro, J., Nieto, L.M.: *Phys. Lett. A* **360**, 228 (2006)
21. Ganguly, A., Ioffe, M.V., Nieto, L.M.: *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 14659 (2006)
22. Gadella, M., Kuru, Ş., Negro, J.: *Phys. Lett. A* **362**, 265 (2007)
23. Álvarez, J.J., Gadella, M., Heras, F.J.H., Nieto, L.M.: *Phys. Lett. A* **373**, 4022 (2009)
24. Boya, L.J.: *Riv. Nuovo Cim.* **31**, 75 (2008)
25. Hernández, E., Jáuregui, A., Mondragón, A.: *J. Phys. A: Math. Gen.* **33**, 4507 (2000)
26. Antoniou, I.E., et al.: *Chaos Solitons Fractals* **12**, 2719 (2001)
27. Hernández, E., Jáuregui, A., Mondragón, A.: *Phys. Rev. A* **67**, 022721 (2003)
28. Hernández, E., Jáuregui, A., Mondragón, A.: *Phys. Rev. E* **72**, 026221 (2005)

# Apéndice C

## Artículo 3

**J.J. Alvarez**, M. Gadella, L.M. Nieto,

*Dirac comb with a periodic mass jumps,*

Revista Mexicana de Física, **59**, 606-612 (2013)

## Dirac comb with a periodic mass jump

J.J. Alvarez

*E.U. de Informática de Segovia,  
University of Valladolid, Spain.  
jjalvarez@infor.uva.es*

M. Gadella

*Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica, Universidad de Valladolid,  
Facultad de Ciencias, Paseo Belén 9, 47011, Valladolid, Spain.  
e-mail: manuelgadella1@gmail.com*

L.M. Nieto

*Física Teórica, Atómica y Óptica, Universidad de Valladolid, Facultad de Ciencias,  
Paseo Belén 9, 47011, Valladolid, Spain.  
e-mail: luismi@metodos.fam.cie.uva.es*

Received 3 June 2013; accepted 26 July 2013

We discuss some of the properties of the spectrum of a Dirac comb with periodic mass discontinuity. Based on the relationship between the two different masses, we derive the general behavior of the spectra for both cases  $E > 0$  and  $E < 0$ . The relationship with the constant mass model for the Dirac comb and the generalization to periodic quantum chains with  $n$  different masses are also discussed.

*Keywords:* Delta interactions; mass jumps; periodic potentials; energy band structures.

Se discuten algunas de las propiedades del espectro del peine de Dirac con una discontinuidad periódica en la masa. Deducimos el comportamiento general del espectro para los casos  $E > 0$  and  $E < 0$ , basándonos en la relación entre las diferentes masas. También se discute la correspondencia entre nuestros resultados y los obtenidos para el peine de Dirac con masa constante, así como la generalización a cadenas periódicas con  $n$  masas diferentes.

*Descriptores:* Interacciones tipo delta; saltos de masa; potenciales periódicos; estructuras de bandas de energía.

PACS: 03.65.-w; 03.65.Ge

### 1. Introduction

One dimensional Hamiltonians with singular potentials have recently received a lot of attention as they provide examples of exactly solvable models [1–6]. Independently, systems with variable mass have lately acquired some attention in the literature [7–9]. The simplest one dimensional systems with variable mass are those in which the mass is constant except for a discontinuity or jump at a given point. This kind of abrupt discontinuity is interesting from the physicist point of view since it can be used to represent an abrupt heterojunction between two different materials [7].

In the present example, we study a one dimensional system with an interaction in the form of Dirac's comb with two alternating different masses. At the points supporting the deltas the mass is discontinuous and undergoes a jump, it is constant at any other point. The purpose of this article is to discuss the spectral phenomena produced by this kind of periodic systems, an analysis inspired on the study of the Kronig-Penney model.

Here, the Hamiltonian for the system under our consideration can be splitted in the sum of two terms: an unperturbed Hamiltonian  $H_0$  plus a singular potential. In its most general form,  $H_0$  can be written as

$$H_0 = \frac{1}{2} m^\alpha(x) m^\beta(x) m^\alpha(x) \quad (1)$$

with  $2 + = -1$  and  $m(x)$  is an arbitrary function given the mass in terms of the position. Consequently,  $m(x)$  in (1) should be represented as an operator which in general does not commute with the momentum as is a function of the variable  $x$ . In this paper, we shall use some particular form of  $m(x)$  as well as a particular choice of and . This is the purely kinetic term of the Hamiltonian. The total Hamiltonian is of the form  $H = H_0 +$ , where is a singular potential, the Dirac comb that will be defined in precise terms later.

This paper is organized as follows: in Sec. 2, we summarize the results in the case of one delta barrier and one mass jump. The case of Dirac's comb with periodic mass jumps is discussed in Section III, along some ideas concerning generalizations to periodic systems with more different masses. The article is closed with some concluding remarks.

### 2. One Dirac delta with a mass jump at $x = a$

The simplest system of the type discussed in the Introduction includes one delta barrier supported at the point  $x = a > 0$  plus a mass jump at the same point. As was stated in the Introduction, situations with variable mass simulate non-homogeneous media and, in particular, a mass jump mimics



a sudden change in the media. Here, the idea is to combine the mass discontinuity with a delta interaction. This system, which has been already introduced in Ref. 10, is essential for any further generalization. In addition, its inclusion here makes the present article self contained. Then, let us first consider the Hamiltonian  $H_0$  as in (1) with a mass jump at the point  $a > 0$ . Thus, it seems natural to choose the function of the mass in terms of the position  $m(x)$  to be:

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & \text{if } x < a \\ m_2 & \text{if } x > a \end{cases} \quad (2)$$

We have seen that the kinetic term  $H_0$  in (1) depends on the parameter  $\lambda$  (note that if we determine  $\lambda$ , is automatically determined). Among all possible choices,  $\lambda = 0$  and  $\lambda = -1$  is the most natural and, in addition, it has been proven to be Galilei invariant [8]. In Ref. 11 we have proven that a domain of self adjointness for  $H_0$  can be provided by the space of square integrable functions  $\psi(x)$  continuous at  $x = a$  and with the following matching conditions for the first derivative:

$$\frac{1}{m_2} \psi'(a+) - \frac{1}{m_1} \psi'(a-) = 0 \quad (3)$$

In this case, the kinetic term  $H_0$  can be written as [11]:

$$H_0 = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx^2} & x < a \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx^2} & x > a \end{cases} \quad (4)$$

A thoroughly discussion of the self adjoint versions of (4) is given in Ref. 12. Another possibility is introduced in Ref. 10. Also, a discussion on the self adjointness of  $H_0$  with mass jump and arbitrary values of  $\lambda$  can be carried out analogously. However, this is not the relevant discussion in here, where we have in addition to the mass jump, a Dirac delta at the same point  $x = a$ , so that the total Hamiltonian becomes

$$H = H_0 + \lambda \delta(x - a) \quad a > 0 \quad (5)$$

As done with  $H_0$  in Ref. 12, a self adjoint version of (5) should be constructed using the von Neumann formalism of self adjoint extensions of symmetric operators with equal deficiency indices [1,2]. We shall present a brief discussion of this in the next subsection.

**2.1. Self adjoint determination of  $H$  through matching conditions**

According to the theory of self adjoint extensions of symmetric operators, in order to define the total Hamiltonian given in (5), we need to specify a domain,  $\mathcal{D}(H)$  for  $H$ . This domain is a subspace of the space of square integrable functions fulfilling certain conditions plus given matching conditions at  $x = a$ . Thus the functions in the domain of  $H$  belong to

the Sobolev space  $W(\mathbb{R}/\{0\})$  [13] and fulfill the following matching conditions at  $x = a$  [11]:

$$\begin{pmatrix} \psi(a+) \\ \psi'(a+) \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} \psi(a-) \\ \psi'(a-) \end{pmatrix} \quad (6)$$

where  $\psi(a+)$  and  $\psi(a-)$  are the boundary values at  $x = a$  of the function  $\psi \in \mathcal{D}(H)$  to the right and to the left respectively. The  $2 \times 2$  matrix  $\mathcal{T}$  gives the matching conditions at  $x = a$  and the prime denotes derivative with respect  $x$ .

As was proven in a previous article [11], boundary conditions given by  $\mathcal{T}$  define a domain for which  $H$  is self adjoint if and only if [14]

$$\det \mathcal{T} = 1 \quad (7)$$

where,

$$\det \mathcal{T} = \frac{\hbar^2}{2m_i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = 1 \quad (8)$$

The matching conditions that determine the Hamiltonian  $H$  in (5) are [11]

$$\begin{aligned} \psi(a-) &= \psi(a+) = \psi(a) \\ \frac{1}{m_2} \psi'(a+) - \frac{1}{m_1} \psi'(a-) &= \frac{2\lambda}{\hbar^2} \psi(a) \end{aligned} \quad (9)$$

which is a simple generalization of (3). Note that the wave functions on this domain are continuous. The discontinuity in the derivative is the minimal generalization of the discontinuity defining the delta potential allowing for a mass jump. In this particular situation, matrix  $\mathcal{T}$  as in (6) is given by

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{2m_2\lambda}{\hbar^2} & \frac{m_2}{m_1} \end{pmatrix} \quad (10)$$

Thus far the discussion on the construction of the Hamiltonian  $H$  in (5).

**3. The Dirac comb with mass jumps**

Now, we investigate the Dirac comb with mass jumps at the points supporting the deltas. As is well known, the one dimensional Dirac comb is a one dimensional Hamiltonian of the form  $H = -\hbar^2/(2m) d^2/dx^2 + \lambda \sum_n \delta(x - na)$ , where  $\lambda$  is a singular potential given by

$$\lambda(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lambda \delta(x - na) \quad (11)$$

If the constant mass in the kinetic term of the Hamiltonian is replaced by a function of the position  $m(x)$ , we have to

determine this function first. The simplest possible choice is the following:

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & \text{if } 0 \leq x < a \\ m_2 & \text{if } a \leq x < 2a \\ m_1 & \text{if } 2a \leq x < 3a \\ m_2 & \text{if } 3a \leq x < 4a \end{cases} \quad (12)$$

Now, the situation is the following: at each point of the infinite sequence  $a$  with  $n \in \mathbb{Z}$ , where  $\mathbb{Z}$  is the set of the entire numbers, we have a Dirac delta, either attractive or repulsive, plus a mass jump. The function giving the mass in terms of the position is the simplest possible compatible with the existence of a mass jump at each point supporting a delta. This implies that the only possible values of the mass are just two:  $m_1$  and  $m_2$ .

In order to define the Hamiltonian  $H = H_0 + V(x)$ , we follow the procedure suggested in the previous section. Then, we shall determine matching conditions at the points  $x_n = na, n \in \mathbb{Z}$ . These matching conditions will be given by the following relations on the wave functions  $\psi(x)$ :

$$\begin{pmatrix} \psi(na) \\ \psi'(na) \end{pmatrix} = \mathcal{T}_n(a) \begin{pmatrix} \psi((n-1)a) \\ \psi'((n-1)a) \end{pmatrix} \quad (13)$$

where  $\psi(x)$  represents the function  $\psi(x)$ , solution of the Schrödinger equation, on the interval  $[(n-1)a, na]$ . Note that  $\psi(x) = e^{ik_n x} + e^{-ik_n x}$ , where  $k_n = \sqrt{2m_n E/\hbar^2}$ .

**3.1. Determination of the spectrum**

Once we have established the matching conditions for the above situation (11), we would like to obtain its spectrum. The band structure of the spectrum of the Dirac comb is well known [15] and it is depicted in Figs. 1 and 2, where the energy band structure is given by:

$$|\cos ka + \gamma \sin ka| \leq 1 \quad (14)$$

Thus far, we have not distinguished between a comb with repulsive ( $\gamma > 0$ ) or attractive ( $\gamma < 0$ ) deltas. In the case of repulsive deltas, the expression (14) can be written as

$$|\cos(ka - \gamma/a)| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + \gamma^2/k^2}} \quad (15)$$

with  $\tan \gamma/a = \gamma/k$ .

When all deltas are attractive ( $\gamma < 0$  and  $E > 0$ ), there is only one permitted energy band, which is given by

$$|\cosh ka - \gamma \sinh ka| \leq 1 \quad (16)$$

This is shown in Fig. 2.

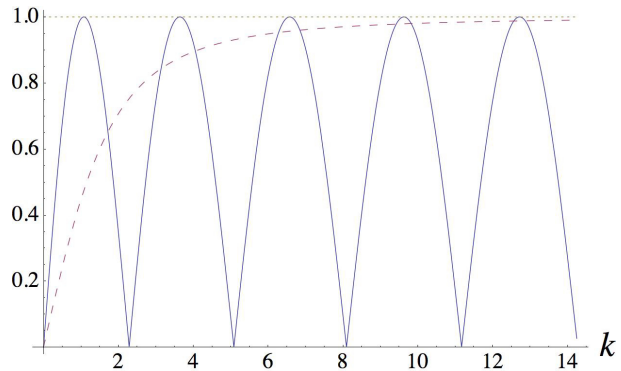


FIGURE 1. Dirac comb with constant mass and  $\gamma = 2$ . Repulsive case.

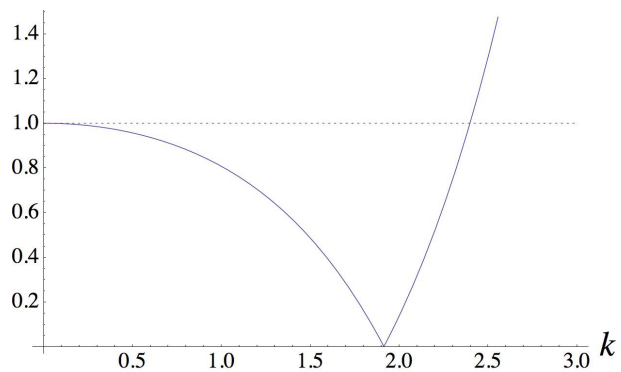
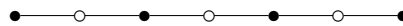


FIGURE 2. Diracs comb with constant mass and  $\gamma = 2$ . Attractive case.

This infinite chain of deltas with mass jumps described so far can be represented in terms of a one dimensional Bravais lattice as follows:



Here the black circles represent the regions with  $m_1$  and the white circles the regions with  $m_2$ . Between them, we draw linking lines representing the matching conditions between two regions. This one dimensional lattice has a periodicity  $2a$ .

If we allocate one black circle at the origin of coordinates and we apply the Bloch theorem, we obtain three wave functions that are the minimal set of solutions of the Schrödinger equation that solve the Bravais lattice:

$$\begin{aligned} I(x) &= e^{ik_1 x} + e^{-ik_1 x} \quad 0 \leq x \leq a \\ II(x) &= e^{ik_2 x} + e^{-ik_2 x} \quad a \leq x \leq 2a \\ III(x) &= (e^{ik_1 x - 2a} + e^{-ik_1 x - 2a}) e^{iK2a} \quad 2a \leq x \leq 3a \end{aligned} \quad (17)$$

Then, applying the matching conditions given by (9) to this set of solutions we get a homogeneous linear system in the variables  $\psi_1, \psi_2, \psi_1, \psi_2$ , whose coefficients are given by the following matrix:

$$\begin{pmatrix} ika & -ika & -i\xi ka & -i\xi ka \\ \frac{-ie^{ika}k-2im\gamma}{m} & \frac{ie^{-ika}k+2im\gamma}{m} & \frac{-ie^{-ik\xi a}k}{m\xi} & \frac{ie^{ik\xi a}k}{m\xi} \\ iK^2a & iK^2a & -2ik\xi a & 2ik\xi a \\ \frac{-e^{iK^2a}ik-2m\gamma}{m} & \frac{-e^{-iK^2a}ik+2m\gamma}{m} & \frac{ie^{-2ik\xi a}k}{m\xi} & \frac{-ie^{2ik\xi a}k}{m\xi} \end{pmatrix} \quad (18)$$

where

$$\frac{m_2}{m_1} = \frac{2}{1} \quad m = m_1 = 1 \quad (19)$$

The constant  $\xi$  appears as a consequence of the Bloch theorem. In fact, the Bloch theorem states that our wave functions must satisfy the relation  $\psi(x + 2a) = e^{i2Ka}\psi(x)$ , where  $|e^{i2Ka}| = 1$ . Then, the relation  $\xi = \frac{2Ka}{2a}$  defines  $\xi$ .

In order to obtain a nontrivial solution of the above system (17), the determinant of (18) must be zero. If we impose this condition and after some algebra, we arrive to the following condition:

$$\begin{aligned} \cos 2a &= \frac{1}{2} (2 \cos a (\cos a \\ &+ 2m \sin a) - \sin a (-4m \cos a \\ &+ (-4m^2 \xi^2 + \xi^2(1 + \frac{m_2}{m_1})) \sin a)) \end{aligned} \quad (20)$$

In (20) the periodicity is expressed in terms of the energy and all the other parameters. As a consequence, we shall obtain a band spectrum for both the attractive ( $\gamma < 0$ ) and the repulsive ( $\gamma > 0$ ) cases.

Our results show that the dependency on  $\xi$  is rather complicated as is shown in Figs. 3 and 4.

In the repulsive case (Fig. 3), we can observe that the band structure including the mass jumps does not differ much from the band structure that appears in the constant mass case. See Fig. 1.

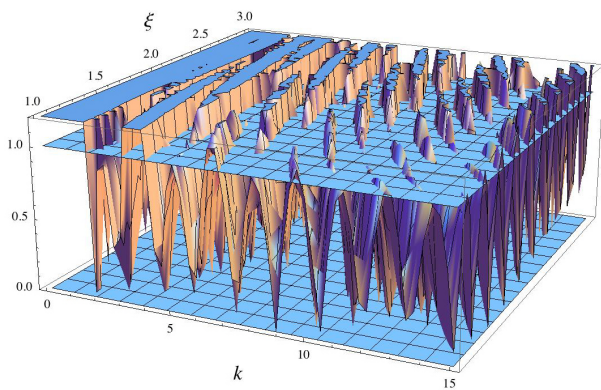


FIGURE 3. 3D plot of the energy bands for  $\xi = 1$  to  $\xi = 3$  with  $\gamma = 2$ . Repulsive case.

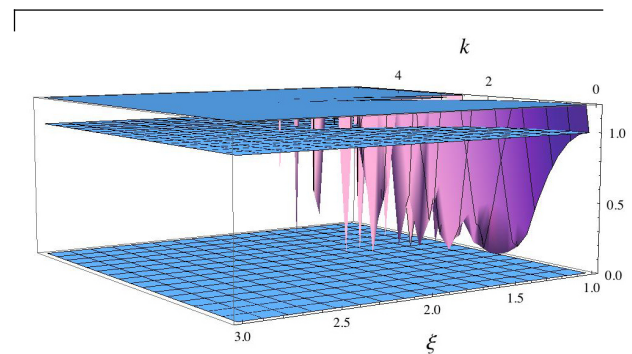


FIGURE 4. 3D plot of the energy bands for  $\xi = 1$  to  $\xi = 3$  with  $\gamma = 2$ . Attractive case.

In the attractive case with constant mass, Fig. 2, we have only one band. It is noteworthy to remark that, in the mass jumps case, the longer is  $\xi^2 = m_2/m_1$ , i.e., the bigger is the ratio between masses, the narrower is the energy band width. This effect is shown in Figs. 5 and 6, where we depict the band for the values  $\xi = 15$  in Fig. 5 and  $\xi = 28$  in Fig. 6. In both cases, the width is shown by the distance between the two blue lines measured over the  $k$  axis. This can be compared to the energy band width for the equal masses case,  $\xi = 1$ . This latter case has been already studied by Cerveró and coworkers [16].

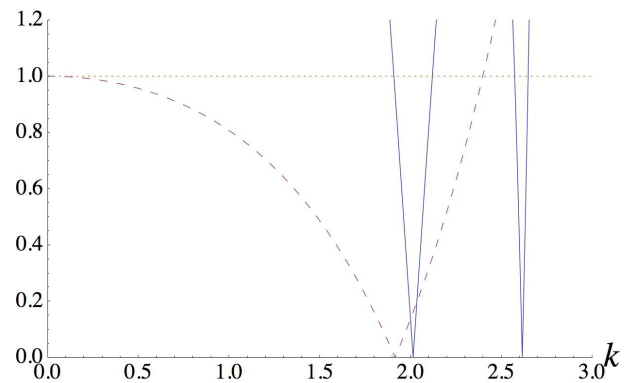


FIGURE 5. Energy bands for the attractive case with  $\gamma = 2$ ,  $\xi = 1.5$ .

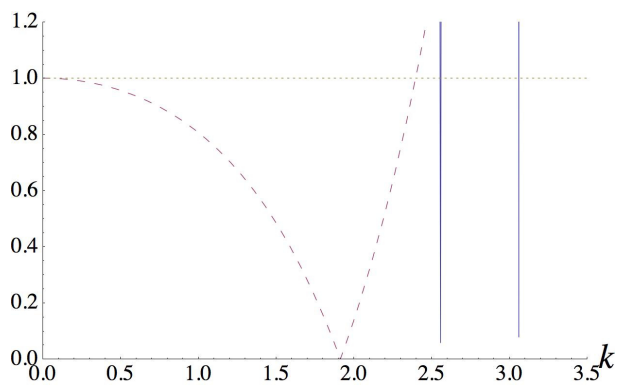


FIGURE 6. Energy bands for the attractive case with  $\gamma = 2$ ,  $\xi = 2.5$ .

3.2. Limit cases for

In this section we will study the limits for the “strong coupling” ( $m_1 \gg m_2$ ) and “weak coupling” ( $m_1 \sim m_2$ ). Here, we use  $a = 1$  and  $m = m_1 = 1$  for simplicity. In the first case, the limit of  $\rightarrow 0$  on the Eq. (20) gives:

$$|\cos(\dots)| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + (\frac{k}{2} - \frac{2\gamma}{k})^2}} \tag{21}$$

with  $\tan \dots = (2/\dots) - (\dots/2)$ . The behavior of (21) is shown in Figs. 7 and 8. It is clear that the band width goes to zero if we start at the point  $m = 2\sqrt{\dots}$  and we take both limits  $\rightarrow 0$  and  $\rightarrow +\infty$ . At this starting point, the equation on the right term in (21) gets its maximum. We observe a perturbation on the permitted energy band closest to the point  $m$  which doubles this band. This effect depends on the parameter  $\dots$ . This splitting is periodic in  $\dots$  and occurs at the values  $n = \dots^2(\dots^2/4)$ , with  $\dots \in \dots$ . This comes from the values of that minimize condition (21).

In the weak coupling case ( $m_1 \sim m_2$ ):

$$\left(1 - \left(\dots\right)^2\right) \cos 2\dots + \frac{2}{\dots} \sin 2\dots + \left(\dots\right)^2 \leq 1 \tag{22}$$

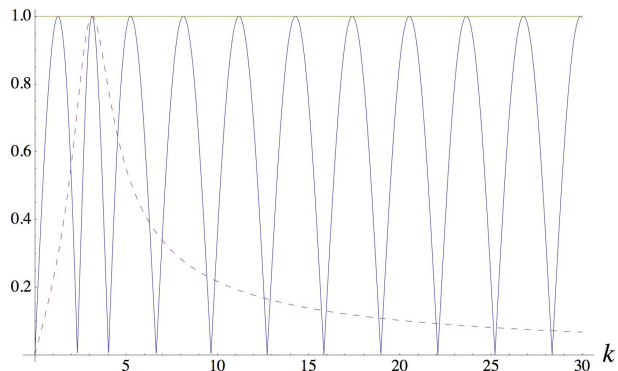


FIGURE 7. Energy bands for the repulsive case and the strong coupling limit,  $\gamma_1 = \frac{2}{\dots}$ .

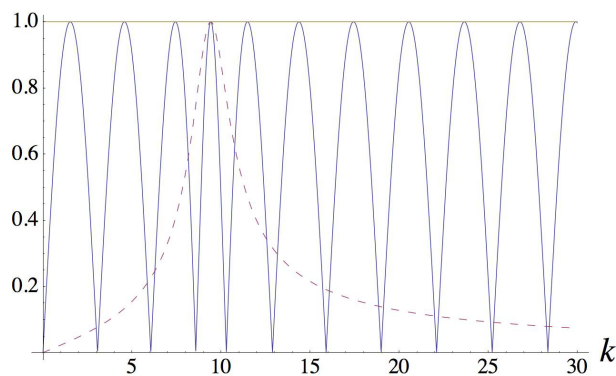


FIGURE 8. Energy bands for the repulsive case and the strong coupling limit,  $\gamma = \frac{2}{\dots}$ .

we observe, in the case  $\dots$ , the same band structure as observed for equal masses, which is shown in Fig. 1.

For low energies, the condition:

$$(\dots + 2) \leq \dots^2 \tag{23}$$

is easily derived. In this case, it appears one permitted energy band only, which gets narrower as  $\dots$  grows, up to saturate the inequality (23). This is depicted in Figs. 9 and 10.

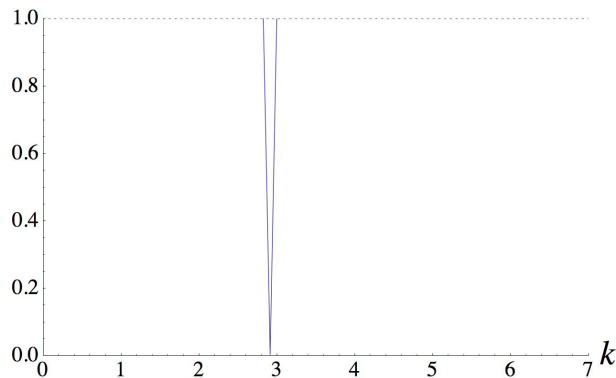


FIGURE 9. Energy bands for the repulsive case for the weak coupling,  $\gamma = 2$ .

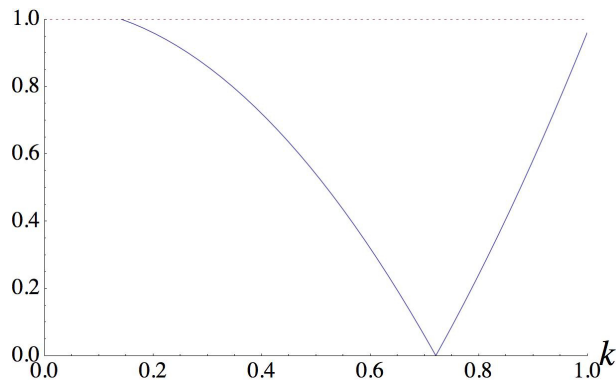


FIGURE 10. Energy bands for the repulsive case for the weak coupling,  $\gamma = 0.01$ .

#### 4. Concluding remarks

We derive the spectrum of a Dirac comb with a jump of mass located at the points supporting the deltas. We analyze the simplest problem in which the mass has two values only. In addition, all the deltas are multiplied by the same coefficient which is either positive or negative. The result is a periodic potential which can be analyzed with the help of the Bloch theorem.

We may be tempted to generalize this model with the introduction on more different masses  $m_3, m_4, \dots, m_n$ . However, this generalization does not give us anything new as it provides the same one dimensional Bravais lattice and is therefore equivalent to the situation here considered. Moreover, the introduction of more masses has the undesirable effect of complicating the situation unnecessarily. In particular, if we had different masses, we would need to deal with an  $2 \times 2$  matrix.

The results obtained depend on the both the sign of  $\delta$  and the square of the ratio between the two different masses. If

$\delta > 0$ , the mass jump does not add any new effect and a band structure appears similar to the usual band structure shown in the case of constant masses. If  $\delta < 0$ , i.e., all deltas are attractive, the band width goes to zero as the ratio between masses goes to infinite.

It is clear that our model is equivalent to a one dimensional Bravais lattice.

The limiting cases “strong coupling” ( $m_1 = m_2$ ) and “weak coupling” ( $m_1 \sim m_2$ ) have been studied. Meanwhile for weak coupling reappears the band structure shown for equal masses, new interesting effects emerge for strong coupling.

#### Acknowledgements

We wish to acknowledge partial financial support by the Spanish Ministry of Science and Innovation through Project MTM2009-10751, the Junta de Castilla y León, through Project GR224.

1. S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, and H. Holden, *Solvable Models in Quantum Mechanics*, (Springer, Berlin, 1988).
2. S. Albeverio and P. Kurasov, *Singular Perturbations of Differential Operators*, (Cambridge U.P., Cambridge, 1999).
3. P. Kurasov, *Journal of Mathematical Analysis and Applications* **201** (1996) 297-323.
4. P. Seba, *Czechoslovak Journal of Physics* **26** (1986) 667-673; F.A.B. Coutinho, Y. Nogami, and J. Fernando Pérez, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **30** (1997) 3937-3945; P.L. Christiansen, H.C. Arnbak, A.V. Zolotaryuk, V.N. Ermakov, and Y.B. Gaididei, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36** (2003) 7589-7600; F.M. Toyama, and Y. Nogami, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **40** (2007) F685-F690; S. Albeverio, L. Dabrowski, and P. Kurasov, *Letters in Mathematical Physics* **45** (1998) 33. T. Fülöp, and I. Tsutsui, *Physics Letters A* **264** (2000) 366-374; P. Hejčík and T. Cheon, *Physics Letters A* **356** (2006) 290-293; C. Fernández, G. Palma, and H. Prado, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **38** (2005) 7509-7518; A.V. Zolotaryuk, *Phys. Rev. A* **87** (2013) 052121; Y. Golovaty, Schrödinger operators with  $(\alpha\delta + \beta\delta)$ -like potentials: norm resolvent convergence and solvable models, arXiv:1201.2610.
5. L.J. Boya, *Rivista del Nuovo Cimento* **31** (2008) 75-139.
6. E. Hernández, A. Jáuregui, and A. Mondragón, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **33** (2000) 4507-4523; I.E. Antoniou et al., *Chaos, Solitons and Fractals* **12** (2001) 2719.
7. R.A. Morrow, and K.R. Brownstein, *Physical Review B* **30**, (1984) 678-680. G.T. Einevoll, and P.C. Hemmer, *Journal of Physics C* **21** (1988) L1193-L1198; J. Thomsen, G.T. Einevoll, and P.C. Hemmer, *Physical Review B* **39** (1989) 12783-12788; G.T. Einevoll, P.C. Hemmer, and J. Thomsen, *Physical Review B* **42** (1990) 3485-3496; J.R.F. Lima, M. Vieira, C. Furtado, F. Moraes, and C. Figueiras, *J. Math. Phys.* **53** (2012) 072101; L.A. González-Díaz and S. Díaz-Solórzano, *J. Math. Phys.* **54** (2013) 042106.
8. J.M. Lévy-Leblond, *Physical Review A* **52** (1995) 1845-1849.
9. N. Moiseyev and R. Lefebvre, *Physical Review A* **64** (2001) 052711; S. Cruz y Cruz, J. Negro, and L.M. Nieto, *Physics Letters A* **369**, (2007) 400-406; A. Ganguly, and L.M. Nieto, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **40**, (2007) 7265-7281; A. Ganguly, S. Kuru, J. Negro, and L.M. Nieto, *Physics Letters A* **360** (2006) 228-233; A. Ganguly, M.V. Ioffe, and L.M. Nieto, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **39** (2006) 14659-14680.
10. M. Gadella, F.J.H. Heras, J. Negro, and L.M. Nieto, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **42** (2009) 465207.
11. J.J. Álvarez, M. Gadella, F.J.H. Heras, and L.M. Nieto, *Physics Letters A* **373** (2009) 4022.
12. M. Gadella, Ş. Kuru, and J. Negro, *Physics Letters A* **362** (2007) 265-268.
13. These are continuous functions (except for a finite jump at the origin) from  $\mathbb{R}$  into  $\mathbb{C}$  such that: (i) any  $\varphi(x) \in W(\mathbb{R}/\{0\})$  admits a first continuous derivative (except at the origin), (ii) the second derivative exists almost everywhere, and (iii) both  $\varphi(x) \in W(\mathbb{R}/\{0\})$  and its second derivative are a.e. square integrable, so that  $\int_{-\infty}^{\infty} \{|\varphi(x)|^2 + |\varphi''(x)|^2\} dx < \infty$ .
14. Here  $H$  is any self adjoint extension of the free Hamiltonian  $H_0$  defined on the space of functions belonging to the Sobolev space  $W(\mathbb{R})$  and such that they vanish on a neighborhood of  $x = a$ . Each matrix  $\mathcal{T}$  defines a self adjoint extension of  $H_0$  and eventually a singular potential, which depends on  $\mathcal{T}$ .
15. S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, (Springer, New York, 1974).

16. J.M. Cerveró, and A. Rodríguez, *European Journal of Physics B* **30** (2002) 503-510; J.M. Cerveró, and A. Rodríguez, *European Journal of Physics B*, **32** (2003) 537-543; J.M. Cerveró, and A. Rodríguez, *European Journal of Physics B* **43** (2005) 543-548.

# Anexo 1

## Documento Anexo 1

J.J. Alvarez, M. Gadella, L.P. Lara, F.H. Maldonado-Villamizar,

*Unstable quantum oscillator with point interactions: Maverick resonances, antibound states and other surprises,*

Physics Letters A, **377**, 2510-2519 (2013)



# Unstable quantum oscillator with point interactions: Maverick resonances, antibound states and other surprises



J.J. Alvarez<sup>a</sup>, M. Gadella<sup>b,\*</sup>, L.P. Lara<sup>c</sup>, F.H. Maldonado-Villamizar<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Escuela Universitaria de Informática, Universidad de Valladolid, 40005 Segovia, Spain

<sup>b</sup> Department of FTAO, Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid, Paseo Belén 7, 47011 Valladolid, Spain

<sup>c</sup> Departamento de Física, FCEIA, Universidad Nacional de Rosario, Avda. Pellegrini 250, Rosario, Argentina

<sup>d</sup> Departamento de Física, Centro de Investigación y Estudios Avanzados del IPN, 07360 México DF, Mexico

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 19 June 2013

Received in revised form 24 July 2013

Accepted 26 July 2013

Available online 2 August 2013

Communicated by P.R. Holland

### Keywords:

Quantum resonances

One-dimensional models

Point potentials

Variable mass

## ABSTRACT

In the search for solvable or quasi-solvable models for resonances, we consider a one-dimensional potential, which is a harmonic oscillator for  $x < 0$ , has a point potential at the origin of the form  $a\delta(x) + b\delta'(x)$  and no interaction for  $x > 0$ . After a study of this model, we add a mass jump at the origin and study the effect of the combination of the mass jump and the point potential. We obtain the behavior of resonances, bound and antibound states in terms of given parameters. In spite of the simplicity of the model, it shows quite interesting and unexpected features.

2013 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

The study and analysis of quantum unstable states or resonances is of particular importance in molecular, atomic or particle physics as well as in quantum chemistry [1]. However, the theory of quantum resonances is far from being complete. Along some serious conceptual and computational problems, like for instance the difficulty of defining averages on decaying states [2,3], we note that there are not many explicit solvable or quasi-solvable models. These models are quite important for a theoretical study of resonance behavior.

Roughly speaking, there are essentially two types of theoretical models for resonances. First of all, we should mention the Friedrichs model [4,5] and other Friedrichs type models [6,7]. With the exception of some complicated versions [8], they are exactly solvable and give a reasonably good idea on the behavior of systems with one or a small number of resonances. The analysis of realistic systems with an infinite number of resonances, requires of a second type of models: those which are solvable numerically up to a reasonable accuracy for a limited although sufficient number of resonances. In both cases, these resonances are given by an interaction depending on one or several parameters. We are also interested in their behavior as these parameters change.

One-dimensional models are often simple, numerically solvable and give interesting non-trivial features on resonance behavior. This fact make them interesting to study. Realistic one-dimensional models are often restrictions of three-dimensional spherically symmetric ones, when restricted to one value of the orbital angular momentum, in the simplest situation  $l = 0$ . If this is the case, they exhibit an impenetrable barrier at the origin (the potential is infinite for  $x < 0$ ). Resonance models of this type have been studied [9,10]. However, we shall not limit ourselves to these cases, as in the example developed in the present Letter.

It is also worthy to remark that resonances often appear in scattering processes [11,12]. An interesting review on scattering in one-dimensional systems is given in a paper by L.J. Boya [13].

The analysis of the Friedrichs or other models has been quite useful in order to investigate properties of resonances in practical cases, as in nuclear, particle physics or quantum chemistry. This analysis should open the door for further investigations on realistic systems with resonances.

The present Letter is a contribution to the analysis of resonance phenomena based on the study of one-dimensional explicit models. Indeed, we here discuss a quite interesting example of one-dimensional numerically solvable model showing unexpected results. For instance the existence of one resonance that does not follow the general pattern with changes on parameter values. Or the presence of virtual states where one would had expected bound states. Or the appearance of bound states when we consider the existence of a mass jump at the origin, when some parameter

\* Corresponding author. Tel.: +34983423145; fax: +34983423013.

E-mail addresses: [manuelgadella1@gmail.com](mailto:manuelgadella1@gmail.com), [gadella@fta.uva.es](mailto:gadella@fta.uva.es) (M. Gadella).



takes exactly two given values and not others. All these features are shown to depend on the values of just one parameter.

Quantum systems with variable mass have been largely studied in the recent past [14]. In particular an abrupt mass jump may serve to describe a situation in which a quantum particle enters into a different media. In the study of one-dimensional systems with a mass jump, potentials of delta type often appear in a natural manner [15]. Thus, the combination of point potentials with a mass jump at the same point are quite natural and produce situations with resonances that may deserve a study. Some examples were given by our group [10].

The model introduced in the present Letter has a simple structure, usually a necessary condition for its solvability. The point of departure is a potential which is a harmonic oscillator for  $x < 0$ , a point potential supported on  $x = 0$  and zero for  $x > 0$ . One-dimensional point potentials at the origin are defined as certain self-adjoint extensions of the differential operator [16]  $-d^2/dx^2$  with domains defined by given matching conditions at the origin. The example here was first introduced by P. Kielanowski and his group [17,18], up to our knowledge. As a matter of fact, we should speak not of a particular model, but a family of models. Two different members of this family differ just in the values of some parameters, as we discuss in here.

In the present Letter, an interaction of the type  $a\delta(x) + b\delta'(x)$  plays an important role, where  $\delta(x)$  is the Dirac delta centered at the origin and  $\delta'(x)$  its derivative. While the term with  $\delta(x)$  does not cause any trouble, the term with  $\delta'(x)$  is ambiguous. In particular, different properties concerning transmission and reflections coefficients has been attributed to potentials including this term [20–24]. The solution to this problem lies on the fact that there are different self-adjoint extensions of the differential operator  $-d^2/dx^2$ , or in our case of  $-d^2/dx^2$  plus the semi-oscillator, that can be interpreted as the addition of a perturbation of the type  $b\delta'(x)$ . These different self-adjoint extensions are defined through some matching conditions at the origin. In our paper, we use one particular choice having a non-zero transmission coefficient [21]. An interesting discussion on the perturbation of the type  $a\delta(x) + b\delta'(x)$  is given in a recent work [25]. The research on this interesting subject goes on [26]. A detailed discussion on this problem lies beyond the aim of the present Letter and can be found in the previously mentioned literature.

This Letter is organized as follows: in Section 2, we provide of the results concerning the half oscillator plus the point potential at the origin. In Section 3, we include a mass jump at the origin in our discussion. Concluding remarks are given in the final section, where we also compare the results with and without the mass jump.

**2. The model: The constant mass case**

Let us consider the following one-dimensional Hamiltonian:

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) + V_2(x), \quad (\hbar = 1), \tag{1}$$

with

$$V_1(x) := \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2x^2 & \text{if } x < 0, \\ 0 & \text{if } x > 0, \end{cases} \tag{2}$$

and

$$V_2(x) = a\delta(x) + b\delta'(x). \tag{3}$$

In the sequel, we shall use the following notation: let  $\psi(x)$  be an arbitrary wave function. Then,  $\psi_1(x)$  and  $\psi_2(x)$  represent the values of this wave function on the regions  $x < 0$  and  $x > 0$  respectively, so that  $\psi(x)$  can be written as

$$\psi(x) = \psi_1(x)H(-x) + \psi_2(x)H(x), \tag{4}$$

$H(x)$  being the Heaviside step function. For the left and right boundary values at the origin of  $\psi(x)$  and its first derivative  $\psi'(x)$ , we shall use

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \lim_{x \rightarrow 0^-} \{\psi_1(x)\}, & \psi_2(0) &= \lim_{x \rightarrow 0^+} \{\psi_2(x)\}, \\ \psi_1'(0) &= \lim_{x \rightarrow 0^-} \{\psi_1'(x)\}, & \psi_2'(0) &= \lim_{x \rightarrow 0^+} \{\psi_2'(x)\}. \end{aligned} \tag{5}$$

As we have remarked in the Introduction, this perturbation of the Hamiltonian is not well defined unless we specify matching conditions at the origin. These matching conditions give the domain of the Hamiltonian and therefore select a self-adjoint implementation of it, according the theory of self-adjoint extensions of symmetric operators with equal deficiency indices [27,16,28].

In the present case, the domain of the Hamiltonian is the set of absolutely continuous square integrable functions having a square integrable second derivative. These functions and their first derivatives satisfy the following matching conditions at the origin:

$$\begin{pmatrix} \psi_2(0) \\ \psi_2'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1+mb}{1-mb} & 0 \\ \frac{2ma}{1-m^2b^2} & \frac{1-mb}{1+mb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(0) \\ \psi_1'(0) \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Observe that these matching conditions are not defined for  $b = \pm 1/m$ . This case will be studied separately later.

Thus, we have separated the configuration space into two regions, one for  $x < 0$  and the other for  $x > 0$ . Correspondingly, the Schrödinger equation can be written in each region as:

$$\psi_1''(x) - m^2\omega^2x^2\psi_1(x) = -2mE\psi_1(x), \quad \text{for } x > 0, \tag{7}$$

$$\psi_2''(x) = -2mE\psi_2(x), \quad \text{for } x < 0. \tag{8}$$

Next, we solve this Schrödinger equation in each region. The procedure is well known although we reproduce it here for the benefit of the reader. First of all, we define the following unknown function:  $\zeta(x) = e^{\alpha x^2} \psi_1(x)$  with  $\alpha = \frac{m\omega}{2}$ . If we use this in (7), we obtain the following equation:

$$\zeta''(x) - 2m\omega x \zeta'(x) + (2mE - m\omega)\zeta(x) = 0. \tag{9}$$

The use of the new variable  $u := m\omega x^2$  transforms Eq. (9) into

$$u\zeta''(u) + \left(\frac{1}{2} - u\right)\zeta'(u) - \left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\omega}\right)\zeta(u) = 0. \tag{10}$$

This is a Kummer equation of second order or confluent hypergeometric equation. Its general form is given by:

$$u\zeta''(u) + (\gamma - u)\zeta'(u) - \alpha\zeta(u) = 0, \tag{11}$$

where  $\alpha$  and  $\gamma$  are constants. The general solution of (11) is given by

$$\zeta(u) = C_1 F_1(\alpha, \gamma; u) + C_2 u^{1-\gamma} F_1(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma; u), \tag{12}$$

where  $C_{1,2}$  are constants and  $F_1(\alpha, \gamma; u)$  is the Kummer function of second order or confluent hypergeometric function.

If we impose the boundary condition  $\psi_1(x) \mapsto 0$  as  $x \mapsto -\infty$ , then, from the asymptotic behavior of the function  $F_1(\alpha, \gamma; u)$ , we obtain the following solution for  $\psi_1(x)$ , after replacing in  $\zeta(u)$  the variable  $u$  in terms of  $x$  and multiplying the result by  $e^{-\frac{1}{2}m\omega x^2}$ :

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= Ce^{-\frac{1}{2}m\omega x^2} \left( F_1\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\omega}, \frac{1}{2}; m\omega x^2\right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{2\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\omega}\right)} \sqrt{m\omega}|x| F_1\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\omega}, \frac{3}{2}; m\omega x^2\right) \right). \end{aligned} \tag{13}$$

Once we have solved the Schrödinger equation for  $x < 0$ , we do the same for  $x > 0$ . At the origin  $x = 0$ , we have to apply the matching conditions given in (4). Then, in the region  $x > 0$ , we obviously have:

$$\psi_2(x) = A \exp\{ikx\} + B \exp\{-ikx\}, \tag{14}$$

with  $k^2 = 2mE$  for positive energies. For negative energies  $E = -|E|$ , the solution has the form:

$$\psi_2(x) = Ae^{-\rho x} + Be^{\rho x}, \tag{15}$$

with  $\rho = \sqrt{2m|E|}$ .

We know that an infinite number of self-adjoint extensions of the operator  $-d^2/dx^2$  on  $L^2[0, \infty)$  have one bound state [30]. The solution (15) for negative values of the energy suggests us the possibility of existence of bound states for some values of  $a$  and  $b$ . For  $a < 0$ , one would have expected the existence of bound states, as the one-dimensional Hamiltonian  $H = -d^2/dx^2 + a\delta(x)$ ,  $a < 0$ ,  $b = 0$ , has one bound state [31]. Also, we should not discard in principle the possibility of the existence of bound states for  $a > 0$ . We shall see what the results are.

It is important to remark that we always choose  $\rho$  positive. Then, note that (case  $b \neq \pm 1/m$ )

$$\psi_2(0) = A + B, \quad \psi'_2(0) = \rho(B - A). \tag{16}$$

Since  $\rho > 0$ , if a bound state existed, then we must have  $B = 0$ , so that matching conditions (4) give:

$$A = \frac{1 + mb}{1 - mb} \psi_1(0),$$

$$-\rho A = \frac{2ma}{1 - m^2b^2} \psi_1(0) + \frac{1 - mb}{1 + mb} \psi'_1(0), \tag{17}$$

so that,

$$\rho = -\frac{2ma}{(1 + mb)^2} - \frac{2(1 - mb)^2}{(1 + mb)^2} \frac{\psi'_1(0)}{\psi_1(0)}. \tag{18}$$

The limit values at the origin of the solution for  $x < 0$  can be easily evaluated from (13):

$$\psi_1(0) = C, \quad \psi'_1(0) = 2C\sqrt{m\omega} \frac{\Gamma(\frac{3}{4} + \frac{|E|}{2\omega})}{\Gamma(\frac{1}{4} + \frac{|E|}{2\omega})}. \tag{19}$$

Now, observe that  $\Gamma(x)$  is positive for  $x > 0$ . This can be seen using the integral expression for  $\Gamma(x)$ , valid for  $x > 0$  ( $x$  real):

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} dt. \tag{20}$$

This fact implies that if one has  $a > 0$  in (18), then we have that  $\rho < 0$ , which is in contradiction with our choice  $\rho > 0$ . Thus, if  $a > 0$  no bound states may exist. Same for  $a = 0$ . If  $a < 0$ , bound states may exist only if

$$|a| > (1 - mb)^2 \sqrt{\frac{\omega}{m}} \frac{\Gamma(\frac{3}{4} + \frac{|E|}{2\omega})}{\Gamma(\frac{1}{4} + \frac{|E|}{2\omega})}. \tag{21}$$

In this case, we have to solve the following transcendental equation in order to obtain the energy of possible bound states:

$$\sqrt{2m|E|} = \frac{2m|a|}{(1 + mb)^2} - \frac{2(1 - mb)^2}{(1 + mb)^2} \frac{\Gamma(\frac{3}{4} + \frac{|E|}{2\omega})}{\Gamma(\frac{1}{4} + \frac{|E|}{2\omega})}. \tag{22}$$

Concerning the exceptional case  $b = \pm 1/m$ , matching conditions (6) are obviously invalid. In order to determine the corresponding self-adjoint determinations of  $H$ , one uses the following

matching conditions labeled in the paper by Kurasov [16] as 3 (Eq. (21) of the mentioned reference):

$$\psi_1(0) = 0, \quad \psi'_2(0) = \frac{2ma}{4} \psi_2(0). \tag{23}$$

The explicit forms of  $\psi_1(x)$  and  $\psi_2(x)$  are again given by (13) and (14) respectively. From (13) one obviously has  $C = 0$  so that  $\psi_1(x) \equiv 0$ , the solution vanishes for  $x < 0$ . For  $\psi_2(x)$ , one finds from (16) and (23):

$$\rho = \sqrt{2m|E|} = \frac{ma}{2} \frac{A + B}{A - B}. \tag{24}$$

Bound states correspond to negative energies and square integrable eigenfunctions. Here, the presence of a bound state is realized for  $B = 0$ , otherwise (15) is not square integrable. The corresponding energy value is immediately obtained from (24) and is:

$$E = -\frac{ma^2}{8}. \tag{25}$$

This is the energy for the bound state corresponding to the self-adjoint determinations of (1) with  $b = \pm 1/m$ . Note that then the transmission coefficient from right to left at the origin vanishes.

The search for resonances seems a bit more complicated. Resonances are characterized by the existence of an outgoing wave without incoming wave. This is the *outgoing boundary condition*. It requires that  $B$  in (14) vanishes. Eqs. (16) should now be replaced by

$$\psi_2(0) = A + B, \quad \psi'_2(0) = ik(A - B). \tag{26}$$

The condition  $B = 0$  implies that  $\psi_2(0) = A$  and  $\psi'_2(0) = ikA$ . Now, boundary conditions (4) yield to equations similar to (17) and (18) with  $-\rho$  replaced by  $ik$ , where  $k = \sqrt{2mE}$ . In the square root, we have chosen the branch with the cut over the negative semiaxis. We obtain the following expression:

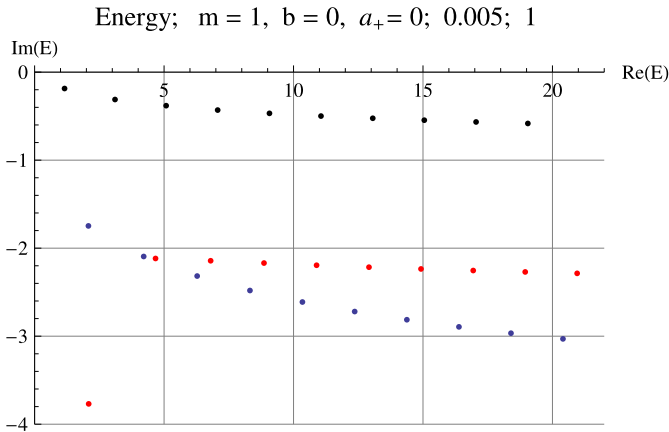
$$i\sqrt{2mE} = \frac{2ma}{(1 + mb)^2} + \frac{2(1 - mb)^2}{(1 + mb)^2} \frac{\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\omega})}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\omega})}. \tag{27}$$

Solutions on  $E$  to this transcendental equation should be complex, due to the presence of the imaginary unit  $i$  in the left hand side. In our discussion here, we are explicitly excluding the values  $b = \pm 1/m$ . Solutions of the form  $E = E_R - i\Gamma/2$  with  $E_R > 0$  and  $\Gamma > 0$  are associated to resonances.

The use of numerical methods to solve Eqs. (22) and (27) is the only possible alternative. To begin with, one slight simplification is in order here. Note that our equations are invariant under the following change of scale:  $m\omega \mapsto m$ ,  $\frac{E}{\omega} \mapsto E$ ,  $\frac{a}{\omega} \mapsto a$  and  $\frac{b}{\omega} \mapsto b$ . This change of scale permits us to avoid the constant  $\omega$ . The explicit form of all our formulas after using this change of scale is obvious.

The next step is to obtain numerical values for resonances in order to understand their behavior in terms of variations of the parameters  $a$  and  $b$ . To this end, we may attempt to solve numerically the complex transcendental equation (27). However, this is not an efficient method. In fact, we deal with a transcendental complex equation with a complex undeterminate. This is equivalent to a pair of coupled real transcendental equations with two real undeterminates. The resulting system is rather complicated. Instead, we propose the following strategy: From (27), we write  $a$  in terms of  $E$ ,  $b$  and  $m$ . The final expression is then:

$$a = \frac{1}{2m} \left[ i(1 + mb)^2 \sqrt{2mE} - 2(bm - 1)^2 \frac{\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{E}{2})}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{E}{2})} \right] = F(E, b, m). \tag{28}$$



**Fig. 1.** Resonances for given values of  $a$  and  $m = 1, b = 0$ . The lowest row (in blue) corresponds to  $a = 0$ . For the next one (in red) we have chosen  $a = 0.005$ . The third one corresponds to  $a = 1$ . (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this Letter.)

Note that, while  $a$  must be real, the right hand side of (28) is complex. In addition, along  $k$  one should also have take into account  $-k$ , so that we should consider both signs in the square root  $\sqrt{E}$ . Correspondingly, we have a couple of solutions for  $a$  that we denote as  $a_{\pm}$ , where the sign in the subindex corresponds to the sign  $\pm\sqrt{E}$  of the root. For the moment, let us consider  $a_+$  only.

Let us fix a value for  $a_+$ , say  $a_0$ ,  $a_0$  being an arbitrary real number (possibly zero). Then, solutions for (28) and therefore for (27) are obtained through the following system of equations, for fixed  $m$  and  $b$ :

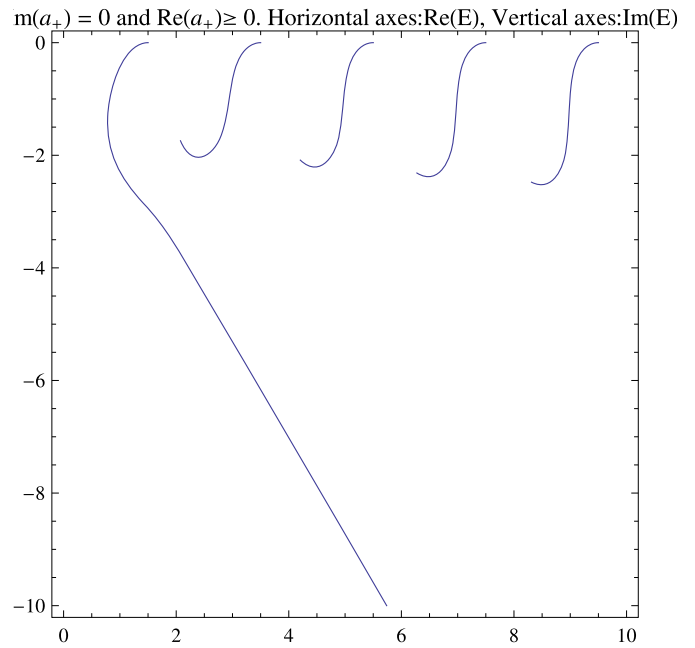
$$\text{Real } F(E, b, m) = a_0; \quad \text{Im } F(E, b, m) = 0. \tag{29}$$

In Fig. 1, we depict the first resonances (ordered by the values of their real part) in the simplest case of  $m = 1$  and  $b = 0$  for some values of  $a$ . The lowest row of resonances correspond the case of  $a = 0$ , which means absence of point interaction at the origin. The existence of resonances even in this trivial case is somehow unexpected (a naive intuition suggests that the delta barrier at the origin would have been necessary in order to produce these resonances) and this is one of the surprises arisen in the present model.

We also observe that for positive values of  $a$ , the imaginary part of the resonances becomes smaller in modulus, i.e., closer to the horizontal axis. The higher the value of  $a$ , the smaller the modulus of the imaginary parts of all resonances is. As examples, we have pictured the cases  $a = 0.005$  and  $a = 1$  in Fig. 1. We observe a fast decrease in the modulus of imaginary parts of resonance energies as  $a$  slightly increases above zero.

Recall that the inverse of the imaginary part of the resonance energy is proportional to the mean life. Thus, the previous analysis states that the bigger  $|a|$  is the more stable the resonances become. As proven by Espinosa and Kielanowski [17], in the limit  $a \mapsto \infty$ , resonances become bound states as their negative parts go to zero. This result is an expected one. Note that this is just a limiting behavior, no finite values of  $a$  will transform any resonance into a bound state. These limit energies coincide with the energy of odd bound states for the harmonic oscillator [17,18].

But now, we find something strange. Note on the isolated resonance that appears near the lower left corner in Fig. 1. This is the first resonance in the series corresponding to the value  $a = 0.005$ . This resonance truly exists and it does not appear due to any calculation error. As the value of  $a$  goes to zero, the real part of this resonance goes to infinity and its imaginary part to  $-\infty$ , so that this resonance does not appear in the limit  $a = 0$ . This particu-



**Fig. 2.** Behavior of the first five resonances with  $a_+ > 0$ . The curve in the left corresponds to the first resonance.

lar behavior is weird and we do not have any explanation for it. We call this first resonance a *maverick resonance* due to its unusual behavior.

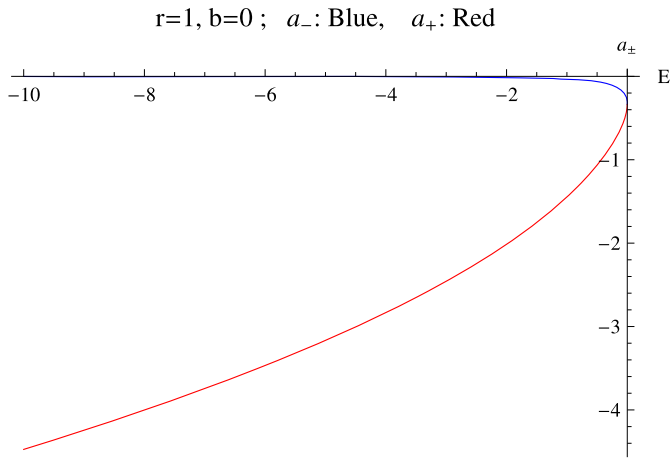
Fig. 2 permits us a better look at this behavior of the maverick resonance. We have here the location of the first five resonances (ordered by their values of the real part of the energy, from lowest to highest) for different values of  $a_+$ , the first one being the maverick resonance. Each of these curves are parameterized with  $a_+$ . All curves except the first one, begin at the value  $a_+ = 0$ . As  $a_+$  increases, we move along each curve from below to above and the curve approaches to the real axis  $\text{Im } E = 0$ . This also happens for the maverick resonance with the difference that its curve is unbounded, so that its real and imaginary parts go to infinity as  $a_+$  goes to zero. For high values of  $a_+$  the behavior of all resonances are similar as their imaginary parts become smaller and smaller. In the limit  $a_+ \mapsto \infty$  and only in this limit, all resonances become bound states.

In the case of the Dirac well, i.e.,  $a < 0$ , the results are similar as for  $a > 0$ . For small negative values of  $a$ , the first resonance of each series have the same weird behavior. All series of resonances are above the series with  $a = 0$  and the bigger is the absolute value of  $a$  the closer are the resonances to the real axis. In the limit  $a \mapsto -\infty$  and only in this limit, all become bound states. It was proven [17] that these bound states are precisely the odd bound states of the harmonic oscillator.

Let us go back to Eq. (28). It does not have solutions with  $E$  positive and  $b = 0$ , since positive values of  $E$  would give complex values for  $a$ . However, it can be solved for negative values of  $E$ . In that case, we shall use  $a_-$  for  $a$ . We should note that the correspondence between  $a_+$  and  $E$  in one side and  $a_-$  and  $E$  on the other is one to one.

This correspondence is depicted in Fig. 3 for  $m = 1$  and  $b = 0$ . Horizontal coordinates are the negative values of  $E$ . Vertical coordinates correspond to negative values either of  $a_-$  or of  $a_+$  as we explain below. In any case negative values of both  $a_{\pm}$  correspond to negative values of  $a$ .

When we choose the positive sign for the square root, i.e.,  $a_+$ , we observe that bound states appear for values of  $a_+$  below some value. This is determined by the value of the ordinate at which



**Fig. 3.** Bound and virtual states. The red curve corresponds to the region of bound states. The blue curve to the region of virtual (antibound) states. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this Letter.)

the red curve touches the vertical axis. This result is in complete accordance with the condition given in formula (21).

It is noteworthy that we observe that the curve continues with  $a_-$  (blue section of the curve in Fig. 3). In this region, there is also a one to one correspondence between values of  $a_-$  and values of  $E$  (both are always negative here). We keep  $\rho$  always positive so that the negative value of the square root would correspond to  $-\rho$  in (15).

Since the choice of  $a_-$  implies the election of the negative value of the square root, i.e.,  $-\sqrt{E}$ , then the value of  $k$  in (14) is then given by  $k = -\sqrt{-2m|E|} = -i\sqrt{2m|E|} = -i\rho$ .

Along our discussion, we use the so called purely outgoing boundary conditions, so that the solutions of our transcendental equations are the poles of the  $S$ -matrix in the momentum representation  $S(k)$ . In this representation, poles on the positive imaginary axis correspond to bound states. This is the case for  $k = i\rho$ , or equivalently for  $a_+$  (note that we always choose  $\rho > 0$ ). On the other hand, poles of  $S(k)$  on the negative imaginary axis define antibound states (also called virtual states) [29]. Therefore, the values of  $E$  for  $a_-$  do not give bound states but instead antibound states, as in this case  $k = -i\rho$  (here  $\rho > 0$ ).

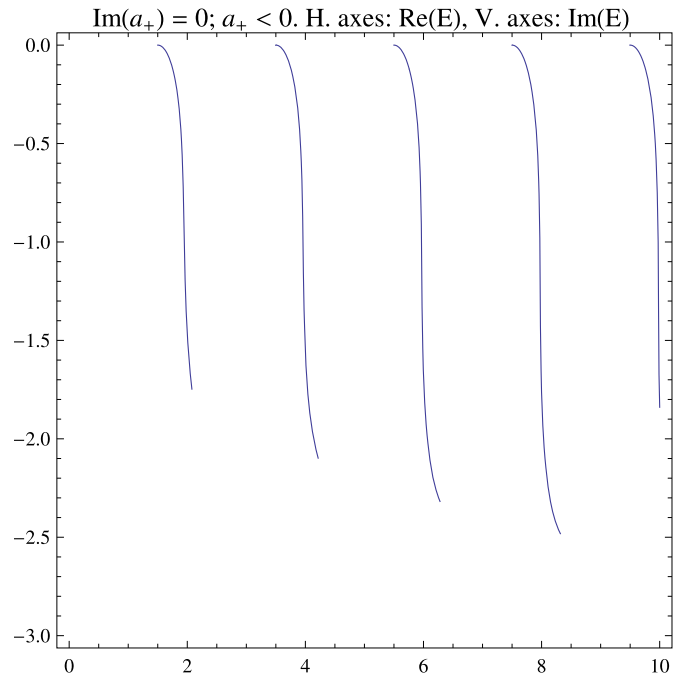
The limit point that separates  $a_+$  and  $a_-$  is the only one for which  $E = 0$ . This situation does not correspond to any physical situation. Note that in this limit, both  $a_{\pm}$  reach a negative value that can be evaluated through (21). For any value of  $b$  with the exception of  $b = 1/m$  this is:

$$-(1 - mb)^2 \sqrt{\frac{1}{m} \frac{\Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)}}. \tag{30}$$

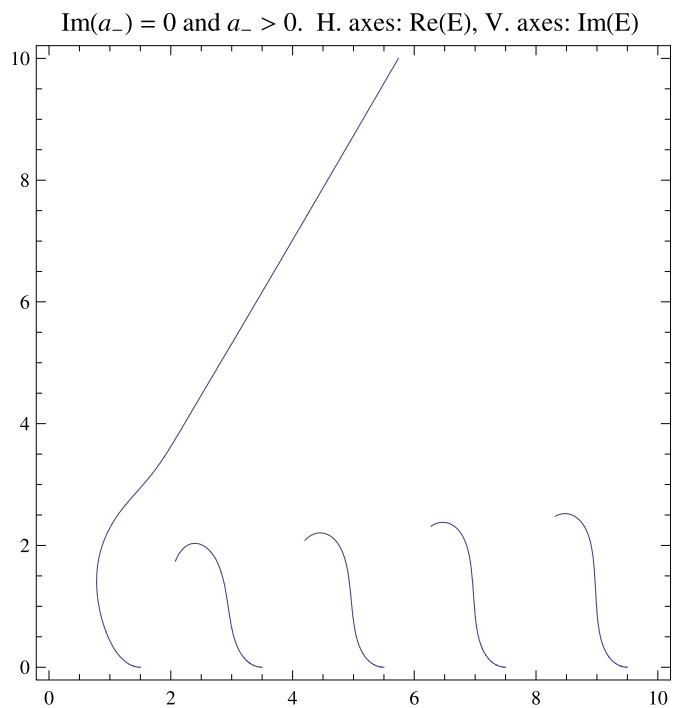
A similar picture as the one in Fig. 2 can be obtained for  $a_+ < 0$  with two differences. One is that for  $a_+ < 0$  the maverick resonance does not appear. Curves for the remaining resonances have been depicted in Fig. 4. Note that the imaginary part of the resonance pole is always negative.

Similar results can be obtained for  $a_-$ . In this case, we find the complex conjugate of the resonance poles already obtained with  $a_+$ . Curves giving the results for  $a_- \geq 0$  and  $a_- < 0$  have a similar shape but they are upside down in relation to curves in Figs. 2 and 4, respectively. In this case, the imaginary part of the resonance pole is always positive. See Fig. 5.

In our preceding discussion, we have taken  $b = 0$ . If  $b \neq 0$ , similar results are obtained. But now, it is worthy to analyze the behavior of resonances for different values of  $b$ . Let us consider the first resonance (in our usual order) and then fix the values of



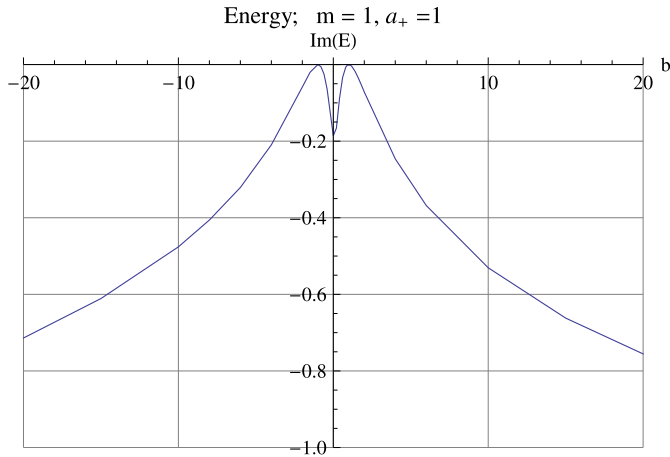
**Fig. 4.** Resonances for  $a_+ < 0$ . Note that the maverick resonance does not appear here.



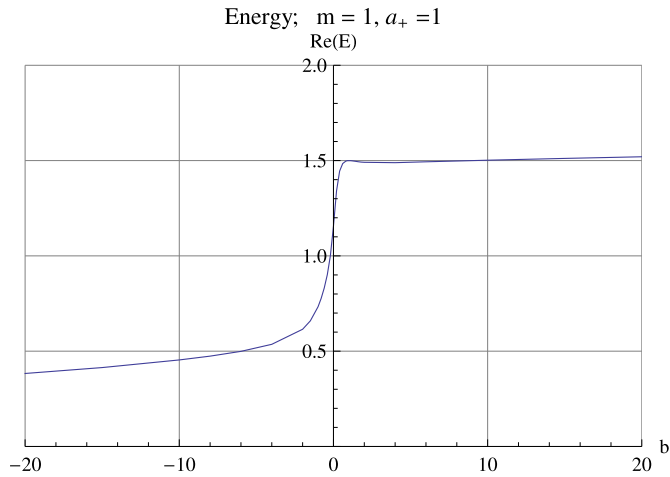
**Fig. 5.** Resonances for  $a_- > 0$ .

$m$  and  $a_+$  and plot the dependence with  $b$  of the imaginary and real parts of this resonance. Take for instance  $m = 1$  and  $a_+ = 1$ . In Fig. 6, we plot the dependence of the imaginary part in terms of  $b$ . We choose positive and negative values of  $b$  around  $b = 0$ . It is interesting to remark that for the values  $b = \pm 1/m$ , the imaginary part of the energy is equal to zero. For these two values, resonances collapse into a bound state.

The behavior of the real part of the first resonance is depicted in Fig. 7. The real part increases slowly as  $b$  goes from  $-\infty$  to approximately  $b = -2$ . From this value and up to  $b = 1$ , the value of



**Fig. 6.** Behavior of the imaginary part of the first resonance with  $m = 1$  and  $a_+ = 1$  with  $b$ . We observe that in the limit when  $b \mapsto \pm 1/m$ , the imaginary part goes to zero. Observe that the plot is not exactly symmetric with respect to  $b = 0$ .



**Fig. 7.** Behavior of the real part of the first resonance with  $m = 1$  and  $a_+ = 1$  with  $b$ .

the real part grows abruptly and after  $b = 1$  it becomes practically constant.

We end this section with the following comment: As well known, resonances come into pairs of complex conjugate poles of the  $S$  matrix in the energy representation. This means that if  $E = E_R - i\Gamma/2$  gives a resonance pole, so does its complex conjugate  $E^* = E_R + i\Gamma/2$ . We have characterized resonances as complex solutions of Eqs. (26), which are straightforwardly determined by (28). From the latter and the fact that  $\Gamma(z^*) = \Gamma^*(z)$  (the star denotes complex conjugation), we immediately see that if  $E$  is a solution of (29), so is  $E^*$ . In fact, solutions of Eq. (27) with the positive and negative sign for the square root, corresponding to  $a_+$  and  $a_-$ , are complex conjugate of each other, as we can see comparing Figs. 2 and 5. Therefore, this general feature of resonances trivially appears in the present formalism.

### 3. A mass jump at the origin

The combination of a point potential and a mass jump has been already studied in numerous previous works as mentioned in the Introduction. There are several possibilities and correspondingly, several self-adjoint extensions of a Hamiltonian showing a mass jump. Usually, the Schrödinger equation for a one-dimensional particle with a function of mass  $m = m(x)$  and potential  $V(x)$  is written as (other options are described in a recent paper [32]):

$$-m^\alpha(x) \frac{d}{dx} m^\beta(x) \frac{d}{dx} m^\alpha(x) \psi(x) + V(x) \psi(x) = (K + V) \psi(x) = E \psi(x), \quad (31)$$

with  $2\alpha + \beta = -1$ . A careful analysis [15] shows that  $V(x)$  should contain a point potential of the type  $a\delta(x) + b\delta'(x)$ , so that in the simplest case  $V(x)$  is of this form. In our case, this point potential is superposed to  $V_1(x)$  as in (2) giving the half oscillator, so that the formal Schrödinger equation takes the form:

$$\left\{ -m^\alpha(x) \frac{d}{dx} m^\beta(x) \frac{d}{dx} m^\alpha(x) + V_1(x) + a\delta(x) + b\delta'(x) \right\} \psi(x) = E \psi(x). \quad (32)$$

This equation comes from a Hamiltonian of the form

$$H = K + V_1(x) + a\delta(x) + b\delta'(x). \quad (33)$$

We may define and operate with this Schrödinger equation formally. However, this does not provide of a complete information on the physical problem, due to the already commented fact that the perturbation  $b\delta'(x)$  is not uniquely defined. Therefore, we need to determine a self-adjoint version of this Hamiltonian, for which we need the theory of extensions of symmetric operators. Part of this work has been done. We have discussed a series of self-adjoint definitions [19] of the kinetic term  $K$ . We have added [15] the delta plus delta prime potential. The work of selecting all possible self-adjoint versions of the kinetic term with a mass jump and adding to it all possible point potentials at the mass discontinuity point is still in process.

The function  $m(x)$  that corresponds to a mass jump at the origin can be written as

$$m(x) = m_1 H(-x) + m_2 H(x), \quad (34)$$

where  $H(x)$  is the Heaviside step function. This corresponds to a mass  $m_1$  for  $x < 0$  and  $m_2$  for  $x > 0$ .

The next step consists in using (34) in (32). We have to take into account that functions in the domain of the Hamiltonian should be discontinuous at the origin. Therefore, we have to change the definitions for the product of a function and the delta or delta prime at the origin. The most usual formulas are [16]:

$$\delta(x) \psi(x) = \frac{\psi_1(0) + \psi_2(0)}{2} \delta(x), \quad (35)$$

$$\delta'(x) \psi(x) = \frac{\psi_1(0) + \psi_2(0)}{2} \delta'(x) - \frac{\psi_1'(0) + \psi_2'(0)}{2} \delta(x), \quad (36)$$

where  $\psi_1(0)$  and  $\psi_2(0)$  are defined as in the preceding section. The result is the following set of four equations:

$$-\frac{1}{m_1} \psi_1''(x) + \frac{1}{2} m_1 \omega^2 x^2 \psi_1(x) = E \psi_1(x), \quad (37)$$

$$-\frac{1}{m_2} \psi_2''(x) = E \psi_2(x), \quad (38)$$

$$-\frac{1}{2} (m_2^{\alpha+\beta} \psi_2'(0) - m_1^{\alpha+\beta} \psi_1'(0)) \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} + \frac{a}{2} (\psi_1(0) + \psi_2(0)) - \frac{b}{2} (\psi_1'(0) + \psi_2'(0)) = 0, \quad (39)$$

$$-\frac{1}{2} (m_2^\alpha \psi_2(0) - m_1^\alpha \psi_1(0)) \left( \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} \right) \times \left( \frac{m_1^\beta + m_2^\beta}{2} \right) + \frac{b}{2} (\psi_1(0) + \psi_2(0)) = 0. \quad (40)$$

The solutions for (37) and (38) have been discussed in the preceding section. The difference now lies in the matching conditions at the origin. We have seen in [15] an explicit discussion on this



kind of matching conditions, which comes from (39) and (40). In matrix form, they can be written as:

$$\begin{pmatrix} \psi_2(0) \\ \psi_2'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(0) \\ \psi_1'(0) \end{pmatrix}, \tag{41}$$

where

$$M_{11} = \frac{m_1^\alpha \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} \frac{m_1^\beta + m_2^\beta}{2} + b}{m_2^\alpha \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} \frac{m_1^\beta + m_2^\beta}{2} - b}, \tag{42}$$

$$M_{12} = 0, \tag{43}$$

$$M_{21} = \frac{a(1 + M_{11})}{m_2^{\alpha+\beta} \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} + b} = \frac{4a(m_1^\alpha + m_2^\alpha)(m_1^{\alpha+\beta} + m_2^{\alpha+\beta})}{(2b + m_2^{\alpha+\beta}(m_1^\alpha + m_2^\alpha))(-4b + m_2^\alpha(m_1^\alpha + m_2^\alpha)(m_1^\beta + m_2^\beta))}, \tag{44}$$

$$M_{22} = \frac{m_1^{\alpha+\beta} \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} - b}{m_2^{\alpha+\beta} \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} + b}. \tag{45}$$

These matching conditions define the particular self-adjoint extension used here. It is important to note that for  $m_1 = m_2$ , the above coefficients coincide with the matrix elements given in (6).

In order to obtain an equation of the type (27), we write (41) in another form. Let us take the coefficients  $A$ ,  $B$  and  $C$  as defined in (16) and (19). Using this definition, Eq. (41) reads as:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \tag{46}$$

with

$$\begin{aligned} a_{11} &= -ik_2 \frac{1}{2} \left( m_2^{\alpha+\beta} \left( \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} \right) + b \right) + \frac{a}{2}, \\ a_{12} &= ik_2 \frac{1}{2} \left( m_2^{\alpha+\beta} \left( \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} \right) + b \right) + \frac{a}{2}, \\ a_{21} &= -\frac{m_2^\alpha}{2} \left( \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} \right) \left( \frac{m_1^\beta + m_2^\beta}{2} \right) + \frac{b}{2}, \\ a_{22} &= -\frac{m_2^\alpha}{2} \left( \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} \right) \left( \frac{m_1^\beta + m_2^\beta}{2} \right) + \frac{b}{2}, \\ b_1 &= -\frac{1}{2} \left( m_1^{\alpha+\beta} \left( \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} \right) - b \right) g(E) \sqrt{m_1} - \frac{a}{2}, \\ b_2 &= -\frac{b}{2} - \frac{m_1^\alpha}{2} \left( \frac{m_1^\alpha + m_2^\alpha}{2} \right) \left( \frac{m_1^\beta + m_2^\beta}{2} \right). \end{aligned} \tag{47}$$

Here, we have called,

$$g(E) = \frac{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{E}{2})}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{E}{2})}. \tag{48}$$

In consequence, the expressions for  $A$  and  $B$  in terms of  $C$  is

$$\begin{aligned} A &= \frac{b_1 a_{22} - a_{12} b_2}{a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}} C, \\ B &= \frac{b_2 a_{11} - a_{21} b_1}{a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}} C. \end{aligned} \tag{49}$$

From (15), a bound state should satisfy simultaneously the conditions  $E < 0$  and  $B = 0$ . The latter condition can be written as:

$$b_2 a_{11} - a_{21} b_1 = 0. \tag{50}$$

The explicit form of (50) is rather cumbersome and gives the equation for the energy of a possible bound state. This explicit form is

$$\begin{aligned} \sqrt{2m_2|E|} + a \frac{h(m_1, m_2) + h(m_2, m_1)}{(f(m_2, m_1) + b)(h(m_1, m_2) + b)} \\ + \frac{(h(m_2, m_1) - b)(f(m_1, m_2) - b)}{(f(m_2, m_1) + b)(h(m_1, m_2) + b)} g(-|E|) \sqrt{m_1} = 0, \end{aligned} \tag{51}$$

with

$$\begin{aligned} h(x, y) &= x^\alpha \left( \frac{x^\alpha + y^\alpha}{2} \right) \left( \frac{x^\beta + y^\beta}{2} \right), \\ f(x, y) &= x^{\alpha+\beta} \left( \frac{x^\alpha + y^\alpha}{2} \right). \end{aligned} \tag{52}$$

In the limit case when  $m_1 = m_2$ ,  $h(m, m)$  becomes equal to  $f(m, m)$  under the prescription  $2\alpha + \beta = -1$  and we recover (22). Take now,  $r = \frac{m_2}{m_1}$  and  $2\alpha + \beta = -1$ . Then, (45) becomes:

$$\begin{aligned} \sqrt{2Er} &= -\frac{2a(1 + r^{-1-2\alpha})(1 + r^\alpha)^2}{(2b + \frac{1+r^{-\alpha}}{r})(4b + (1 + r^{-1-2\alpha})(1 + r^\alpha))} \\ &\quad - \frac{2(1 - 2b + r^\alpha)(-4b + r^\alpha(1 + r^{-1-2\alpha})(1 + r^\alpha))\Gamma[\frac{3}{4} + \frac{E}{2}]}{(2b + \frac{1+r^{-\alpha}}{r})(4b + (1 + r^{-1-2\alpha})(1 + r^\alpha))\Gamma[\frac{1}{4} + \frac{E}{2}]}. \end{aligned} \tag{53}$$

Using numerical estimations in (53), we can show the existence of bound states for some values of the parameters and the non-existence of bound states for other values. In any case, we need a thoroughly study of this phenomena and this can be done in the same spirit than in the previous case without mass jump.

We have seen that resonances are calculated under the assumption of purely outgoing boundary conditions i.e.,  $B = 0$ . With this idea in mind, a straightforward calculation shows that the equation

$$\begin{aligned} i\sqrt{2m_2E} &= a \frac{h(m_1, m_2) + h(m_2, m_1)}{(f(m_2, m_1) + b)(h(m_1, m_2) + b)} \\ &\quad + \frac{(h(m_2, m_1) - b)(f(m_1, m_2) - b)}{(h(m_1, m_2) + b)(f(m_2, m_1) + b)} g(E) \sqrt{m_1} \end{aligned} \tag{54}$$

give the resonances. Taking again  $r = \frac{m_2}{m_1}$  and  $2\alpha + \beta = -1$ , we have (provided  $m_2 = 1$ ):

$$\begin{aligned} i\sqrt{2Er} &= \frac{2a(1 + r^{-1-2\alpha})(1 + r^\alpha)^2}{(2b + \frac{1+r^{-\alpha}}{r})(4b + (1 + r^{-1-2\alpha})(1 + r^\alpha))} \\ &\quad + \frac{2(1 - 2b + r^\alpha)(-4b + r^\alpha(1 + r^{-1-2\alpha})(1 + r^\alpha))\Gamma[\frac{3}{4} - \frac{E}{2}]}{(2b + \frac{1+r^{-\alpha}}{r})(4b + (1 + r^{-1-2\alpha})(1 + r^\alpha))\Gamma[\frac{1}{4} - \frac{E}{2}]}. \end{aligned} \tag{55}$$

The total number of resonances in our model for given values of the parameters  $r$ ,  $a$ ,  $b$  and  $\alpha$  is infinite in general. In order to obtain numerical estimates, one needs to fix the values of some parameters. Our choice for  $\alpha$  is  $\alpha = 0$  which implies  $\beta = -1$ . This choice has been proven to be compatible with Galilean invariance [33].

As we did in the case of constant mass, we need to give a formula for  $a$  in terms of the other parameters. As we have chosen a value for  $\alpha$ , we have  $r$  as the only new parameter. This is:

$$a = \frac{i(1 + br)(1 + r + 2br)\sqrt{2E} - \frac{2(-1+b)r(-1+(-1+2b)r)\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{E}{2})}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{E}{2})}}{2r(1 + r)}. \tag{56}$$

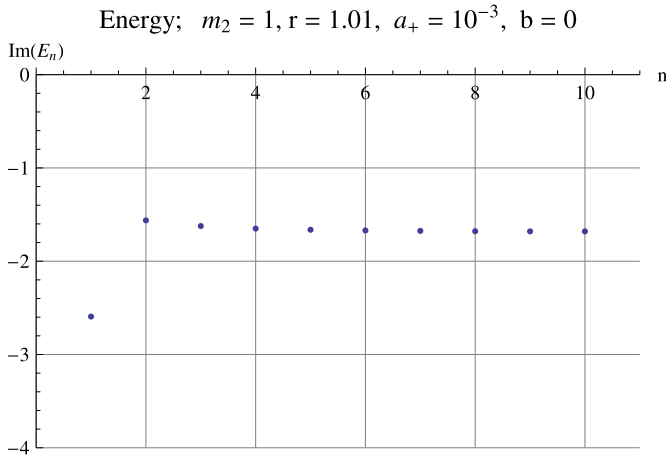


Fig. 8. Maverick resonance with  $r = 1.01$ ,  $a_+ = 10^{-3}$  and  $b = 0$ .

As in the previous case, we discriminate  $a_+$  from  $a_-$  depending on the choice of the sign in the square root of  $E$ . Thus, the difference between  $a_+$  and  $a_-$  lies in the sign in front of the first term in the numerator of (56).

The results obtained are similar to those obtained for the case of constant mass, with the following differences:

(1) The maverick resonance only appears for values of  $r$  (ratio between masses) close to one, i.e., for small mass jumps. As  $r$  goes apart from one, either bigger or smaller, the effect of maverick resonance becomes more negligible. In our level of precision, this effect is unobservable above of  $r = 1.5$  or below  $r = 0.5$ . In Fig. 8, we obtain the position of the maverick resonance for  $r = 1.01$ ,  $a_+ = 10^{-3}$  and  $b = 0$ .

(2) There are differences with respect to the data in Fig. 6. As happens in absence of mass jump, the dependence of the imaginary part of the resonance with  $b$ , does not depend essentially on the choice of  $a_+$ . When  $r \neq 1$  the curve which gives the dependence of  $\text{Im} E$  with  $b$  still has two bumps. The bump located in the region corresponding to  $b < 0$  cuts the axis  $\text{Im} E = 0$  at two points given by the values  $b = -1/r = -m_1$  and  $b = -(r + 1)/2r = -1/2(m_1 + 1)$ . Therefore, there exist solutions with  $\text{Im} E > 0$ . This is not a problem as along one resonance pole it always appears its complex conjugate. In fact, the curve for  $a_-$  is exactly symmetric to the curve for  $a_+$  with respect to the axis  $\text{Im} E = 0$ .

This can be seen in Fig. 9, in which we compare the curve for  $r = 1.5$  with the curve for  $r = 1$  (constant mass) for the first resonance.

In Fig. 10, we show the dependence of the real part of the resonance with  $b$  and  $r$  for the first resonance. The different colors mean different values of  $r$ . We have depicted the curves for  $r = 0.5$  (black),  $r = 1$  (blue) and  $r = 1.5$  (red). Needless to say that  $r = 1$  corresponds to the case without mass jump that we add to the figure just for comparison.

Another remark concerns consistency. Let us go back to Fig. 10. The intersection points of the curve with the real axis  $\text{Im} E = 0$  with  $b < 0$  are  $b = -3/2$  and  $b = -2$  for the black curve ( $r = 1/2$ ) and  $b = -0.66666$  with  $b = -0.83333$  for the red curve ( $r = 3/2$ ). A simple numerical estimation gives us the values of the energy at these intersection points. In both cases,  $\frac{3}{4} - \frac{E}{2} > 0$  and  $-1 < \frac{1}{2} - \frac{E}{2} < 0$ . Then,  $\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{E}{2}) > 0$  and  $\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{E}{2}) < 0$  due to the properties of the Gamma function. For instance, for  $r = 1/2$  (black curve),  $E = 0.644446$  if  $b = -2$  and  $E = 0.6938$  if  $b = -3/2$ . This gives  $\frac{3}{4} - \frac{E}{2} = 0.1056$  and  $\frac{1}{2} - \frac{E}{2} = -0.3994$  for  $b = -2$  and  $\frac{3}{4} - \frac{E}{2} = 0.4031$  and  $\frac{1}{2} - \frac{E}{2} = -0.969$  if  $b = 3/2$ . Thus, for these two values of  $b$ ,  $a$  in Eq. (51) is positive and no contradiction arises. This fact can be seen with any other value of  $r$ .

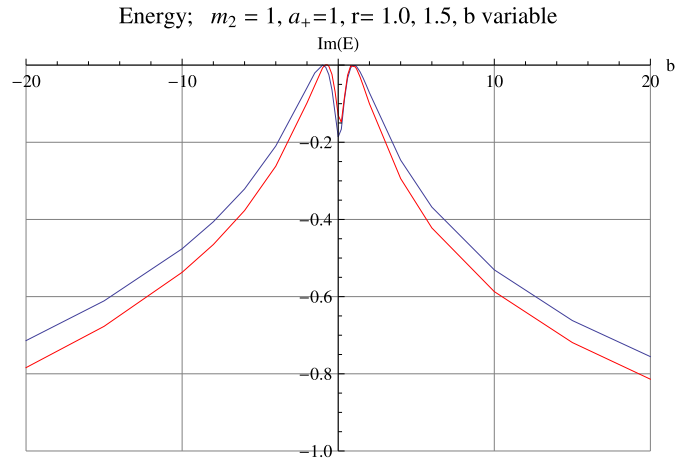


Fig. 9. The variation of  $\text{Im} E$  with  $b$  on a neighborhood of  $b = 0$ , for the first resonance. The red curve corresponds to  $r = 1.5$  and the blue curve to  $r = 1$ . (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this Letter.)

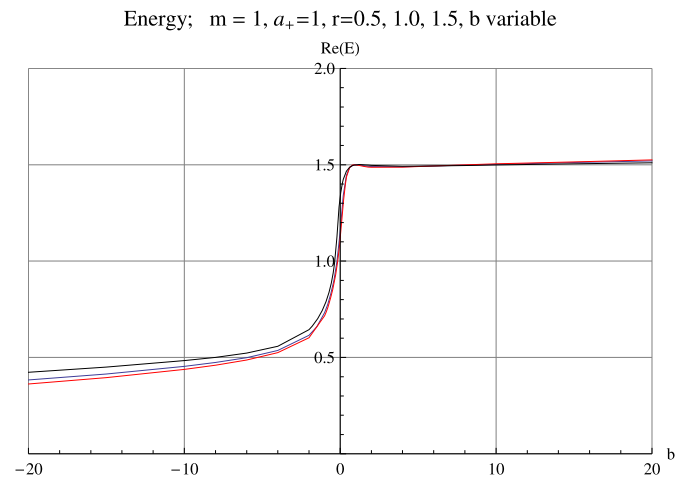
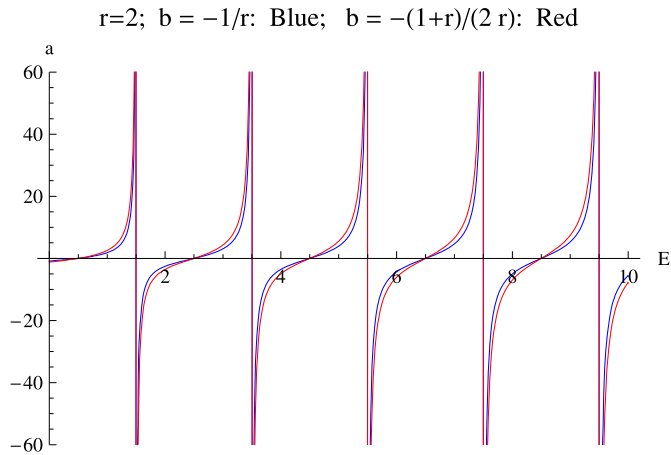


Fig. 10. The variation of  $\text{Re} E$  with  $b$  on a neighborhood of  $b = 0$  for the first resonance. The red curve corresponds to  $r = 1.5$ , the blue curve to  $r = 1$  and the black curve to  $r = 0.5$ . (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this Letter.)

For all other resonances, Figs. 9 and 10 will look like similar. We should note that the curve relating  $\text{Im} E$  to  $b$ , as in Fig. 9, for all resonances will cut the real axis  $\text{Im} E = 0$  at the same points  $b = -1/r$  and  $b = -(1 + r)/2$ . This is a straightforward consequence of (51).

(3) At the critical points,  $b = -1/r$  and  $b = -(r + 1)/2$ , there are not resonances, but one would expect the presence of bound states. What we obtain is a new surprise. Take  $a = 0$  and go back to (56). The first term in the numerator vanishes for these two values of  $b$ . Solutions can only exist if the second term in the numerator also vanishes, which happens only for poles of  $\Gamma(1/2 - E/4)$ . Since the Gamma function has simple poles at zero and the negative integers only, these poles occur at  $E = 2n + 1/2$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Therefore, for  $a = 0$  and both  $b = -1/r$  and  $b = -(r + 1)/2$ , we have an infinite number of bound states, corresponding to the even oscillator levels.

Now, observe Fig. 11. If  $a_0 \neq 0$  is a non-zero constant, let us take the straight line  $a = a_0$ . Then, the energy levels are still infinite and are given by the intersection of  $a = a_0$  with the blue curve, if  $b = -1/r$  and the red curve, if  $b = -(1 + r)/2$ . Contrarily to the case  $a = 0$ , in which both values of  $b$  give the same energy levels, the case  $a \neq 0$  gives two distinct series of energy levels one



**Fig. 11.** Energy levels for bound states at the critical points  $b = -1/r$  and  $b = -(r+1)/2$ . For  $a = 0$  these energy levels correspond to the even oscillator levels. For  $a \neq 0$ , the values of  $E$  result from the intersection of the straight line  $a = \text{constant}$  with the curves.

for  $b = -1/r$  and the other for  $b = -(1+r)/2$ . They are, nevertheless, very similar. These new series of eigenvalues have the form  $E_n = A + Bn$ , where  $B$  is close to 2 and  $A$  varies with  $a$  and  $b$ , as we have observed in numerical experiments.

Apart from these differences on the behavior of resonances with mass jump, all other features remain essentially the same. Fig. 1 has the same shape. Fig. 2 has a similar form for values of  $r$  close to one. Figs. 4 and 5 are similar.

The shape of the equivalent of Fig. 3 with mass jump depends on whether  $r$  is bigger or smaller than one. For  $r$  bigger than one, both bound and antibound states are characterized by negative values of  $E$ , as is depicted on Fig. 12, in which we have chosen  $r = 1.5, b = 0$ . Red line represent bound states and blue line represents antibound states. For  $r < 1$ , we have chosen the value  $r = 0.5$  in Fig. 13. In the abscissa, negative energies are represented. In ordinates the values of  $a_+$  and  $a_-$ . The red curve represents the location of bound states in terms of  $a_+$ . The blue curve shows the relation between the energies of antibound states with  $a_-$ . Note that both relations are one to one. However, bound states are found for negative values of  $a_+$  only, while antibound states are found for values of  $a_-$  above a threshold as well as for positive values of  $a_-$ , in contrast with the situation without mass jump.

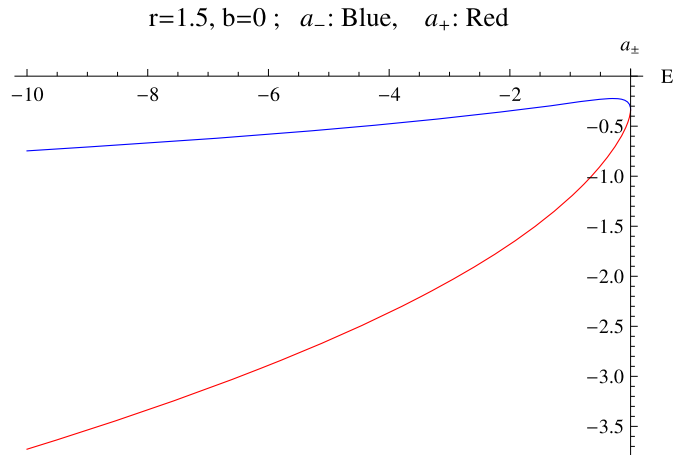
In any case, note that the energy of antibound states is not so close to zero as happens when the mass is constant. This can be seen from the comparison between Fig. 3 and Figs. 12 and 13.

**4. Conclusions**

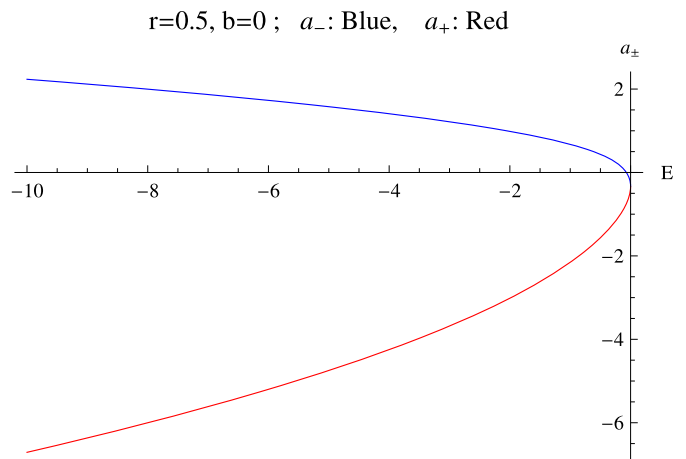
We have studied a resonance model in one-dimension. This is a harmonic oscillator for  $x < 0$ , the free particle for  $x > 0$  and a point potential of the type  $a\delta(x) + b\delta'(x)$  at the origin. We also have considered the effects of the presence of a mass jump at the origin. The conclusions are the following:

**4.1. In absence of mass jump**

(1) There are a (countably) infinite number of resonances even when the point potential is absent. When we switch on the delta interaction  $a\delta(x)$ , where  $a$  is a real constant, resonances have, save for one, larger survival times, no matter whether  $a$  is positive or negative. In the limit  $|a| \mapsto \infty$ , resonances become bound states. These bound states coincide with the odd states of the harmonic oscillator.



**Fig. 12.** Bound and antibound states for  $b = 0$  and  $r = 1.5$ . The red curve shows the position of energies of bound states in terms of  $a_+$ . The blue curve represents the position of the energies of antibound states in terms of  $a_-$ . (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this Letter.)



**Fig. 13.** Same as in Fig. 10, this time we have chosen  $r = 0.5$ . Note the existence of antibound states for  $a_-$  positive. (For interpretation of the references to color, the reader is referred to the web version of this Letter.)

(2) For small values of  $a > 0$ , the first resonance has a weird behavior as compared to the others. As  $a \mapsto 0$ , real and imaginary parts of this resonance go to infinity. This strange situation is exclusive of the first resonance, called here the *maverick resonance*. This happens no matter if we have chosen the sign plus ( $a_+$ ) or minus ( $a_-$ ) in front of the square root  $\sqrt{E}$ . For high values of  $a$  the behavior of this first resonance does not differ from the others.

(3) There exists one and only one bound state for negative values of  $a, a < 0$ , below a certain threshold. Above this threshold and up to zero, there exists one and only one antibound state for each value of  $a$ . It does not exist for the threshold, where  $E = 0$ . The energy of the antibound states is in general very low.

(4) We have analyzed the relation of real and imaginary parts of the resonance with the parameter  $b$  of the  $\delta'(x)$  perturbation,  $b\delta'(x)$ . We observe that this imaginary part goes to zero at the limit points for which the corresponding values of  $b$  are  $b = \pm 1/m$ . At these values, we still can define the corresponding self-adjoint realizations of the Hamiltonian and each resonance collapse into a bound state.

(5) The shape of this imaginary part is not exactly symmetric with respect to  $b = 0$ , as we have guessed due to the property



$\delta'(-x) = -\delta'(x)$ , although it is almost symmetric. We believe that this is an effect of the choice of the self-adjoint extension selected to define the perturbation  $b\delta'(x)$ . As we have remarked above, this self-adjoint choice is not the only one that specifies the perturbation  $b\delta'(x)$ .

(6) The shape of the curve representing the variation of the real part of the resonance with  $b$  is slowly varying up to  $b = -1$ . On the interval  $-1 < b < 1$ , this curve makes a swift change and for  $b > 1$  is practically constant.

#### 4.2. In presence of a mass jump at the origin

(1) The maverick resonance still exists, although this phenomenon is weaker than in the case of constant mass. The phenomenon seems to be stronger near the value  $r = 1$ ,  $r$  being the quotient of masses, but it dimes if  $r$  is a little far from 1 either from above or from below.

(2) The curve giving the dependence of the imaginary part of the resonance also shows two bumps one in the region with  $b$  negative and the other in the region with  $b$  positive. The bump in the region with  $b < 0$  cuts the real axis  $\text{Im}E = 0$  at the points  $b = -1/r$  and  $b = -(1+r)/2$ , the critical points, which depend solely on the value of  $m_1$ , i.e., the mass jump. These two critical points cannot represent resonances.

(3) When  $b$  is in one of the critical points, then our model shows a countable number of bound states. For  $a = 0$  the energy of these bound states coincide for both critical points and is given by the even energy levels of the oscillator. If  $a \neq 0$ , the energy levels corresponding to both critical points are slightly different, but they have the form  $A + Bn$ , where  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $B$  is always close to 2 and  $A$  depends on  $a$  and  $r$ , the mass jump.

(4) All the other features and properties of resonances remain essentially invariable with or without a mass jump. The only difference is the presence of virtual states with positive values of  $a$  and  $r = m_2/m_1 < 1$  ( $m_2$  was chosen to be one). These antibound states have energies which are usually larger (in modulus) than the energies of virtual states in absence of the mass jump.

#### Acknowledgements

Partial financial support is acknowledged to the Spanish Government Grant MTM2009-10751 and Project UNR-ING 195 Argentina.

#### References

- [1] E. Brändas, N. Elander (Eds.), Resonances: The Unifying Route Towards the Unification of Dynamical Process, Springer Lecture Notes in Physics, vol. 325, Springer, Berlin, 1987.
- [2] T. Berggren, Nucl. Phys. A 109 (1968) 265–287.
- [3] O. Civitarese, M. Gadella, R. Id Betan, Nucl. Phys. A 660 (1999) 255–266.
- [4] K.O. Friedrichs, Commun. Pure Appl. Math. 1 (1948) 361–406.
- [5] L.P. Horwitz, J.P. Marchand, Rocky Mt. J. Math. 1 (1971) 225–254.
- [6] M. Gadella, G.P. Pronko, Fort. Phys. 59 (2011) 795–859.
- [7] S. Longhi, Eur. Phys. J. B 57 (2007) 45–51; F.H. Gaioli, E.T. García-Alvarez, J. Guevara, Int. J. Theor. Phys. 36 (1997) 2167–2207; I. Antoniou, E. Karpov, G. Pronko, E. Yarevsky, Int. J. Theor. Phys. 42 (2003) 2403–2421.
- [8] O. Civitarese, M. Gadella, Int. J. Mod. Phys. E 15 (2006) 1273–1290; O. Civitarese, M. Gadella, G.P. Pronko, Int. J. Mod. Phys. E 16 (2007) 169–178.
- [9] E. Hernández, A. Jáuregui, A. Mondragón, Phys. Rev. A 67 (2003) 022721; I.E. Antoniou, et al., Chaos Solitons Fractals 12 (2001) 2719–2736.
- [10] J.J. Alvarez, et al., Phys. Lett. A 373 (2009) 4022–4027; J.J. Alvarez, et al., Int. J. Theor. Phys. 50 (2011) 2161–2169.
- [11] R.G. Newton, Scattering Theory of Waves and Particles, Springer, New York, 1982.
- [12] A. Bohm, Quantum Mechanics: Foundations and Applications, third edition, Springer, Berlin, New York, 2002.
- [13] L.J. Boya, Riv. Nuovo Cim. 31 (2008) 75–139.
- [14] G. Bastard, Phys. Rev. B 24 (1981) 5693–6597; O. von Roos, Phys. Rev. B 27 (1983) 7547–7552; Q. Zhu, H. Kroemer, Phys. Rev. B 27 (1983) 3519–3527; R.A. Morrow, K.R. Brownstein, Phys. Rev. B 30 (1984) 678–680; R.A. Morrow, Phys. Rev. B 35 (1987) 8074–8079; J. Thomsen, G.T. Einvoll, P.C. Hemmer, Phys. Rev. B 39 (1989) 12783–12788; G.T. Einvoll, P.C. Hemmer, J. Thomsen J, Phys. Rev. B 42 (1990) 3485–3496; N. Moiseyev, R. Lefevre, Phys. Rev. A 64 (2001) 052711; R. Koç, M. Roca, G. Şahinoğlu, Eur. Phys. J. B 48 (2005) 583–586; A. Ganguly, Ş. Kuru, J. Negro, L.M. Nieto, Phys. Lett. A 360 (2006) 228–233; S. Cruz y Cruz, J. Negro, L.M. Nieto, J. Phys.: Conf. Ser. 128 (2008) 012053.
- [15] M. Gadella, F.J.H. Heras, J. Negro, L.M. Nieto, J. Phys. A: Math. Theor. 42 (2009) 465207.
- [16] P. Kurasov, J. Anal. Math. Appl. 201 (1996) 297–323.
- [17] M.G. Espinosa, P. Kielanowski, J. Phys.: Conf. Ser. 128 (2008) 012037.
- [18] A.E. Domínguez, P. Kielanowski, Int. J. Theor. Phys. 50 (2011) 2252–2258.
- [19] M. Gadella, Ş. Kuru, J. Negro J, Phys. Lett. A 362 (2007) 265–268.
- [20] P. Seba, Rep. Math. Phys. 24 (1986) 111–120.
- [21] M. Gadella, J. Negro, L.M. Nieto, Phys. Lett. A 373 (2009) 1310–1313.
- [22] A.V. Zolotaryuk, Adv. Sci. Lett. 1 (2008) 187–191.
- [23] A.V. Zolotaryuk, Y. Zolotaryuk, J. Phys. A: Math. Theor. 44 (2011) 375305.
- [24] S.Lj.S. Kocinac, V. Milanovic, Modern Phys. Lett. B 26 (2012) 1250092.
- [25] Y. Golovaty, Schrödinger operators with  $(\alpha\delta' + \beta\delta)$ -like potentials: norm resolvent convergence and solvable models, arXiv:1201.2610.
- [26] A.V. Zolotaryuk, Phys. Rev. A 87 (2013) 052121.
- [27] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Höeg-Krohn, H. Holden, Solvable Models in Quantum Mechanics, Springer, Berlin, 1988.
- [28] S. Albeverio, P. Kurasov, Singular Perturbations of Differential Operators. Solvable Schrödinger Type Operators, London Mathematical Society Lecture Notes, vol. 271, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [29] H.M. Nussenzweig, Causality and Dispersion Relations, Academic, New York, London, 1972.
- [30] G. Bonneau, J. Faraut, G. Valent, Am. J. Phys. 69 (2001) 322–331.
- [31] S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, Springer, Berlin, 1994.
- [32] J.R.F. Lima, M. Vieira, C. Furtado, F. Moraes, C. Figueiras, J. Math. Phys. 53 (2012) 072101.
- [33] J.M. Levy-Leblond, Phys. Rev. A 52 (1995) 1845–1849.



## Anexo 2

### Documento Anexo 2

J.J. Alvarez, M. Gadella, L.P. Lara,

*The one dimensional infinite square well with variable mass,*

Applied Mathematical Sciences, **8**, 4285-4300 (2014)

Applied Mathematical Sciences, Vol. 8, 2014, no. 86, 4285 - 4300  
HIKARI Ltd, [www.m-hikari.com](http://www.m-hikari.com)  
<http://dx.doi.org/10.12988/ams.2014.45333>

## The One Dimensional Infinite Square Well with Variable Mass

**J.J. Alvarez**

E.U. de Informática de Segovia, University of Valladolid, Spain

**M. Gadella**

Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica  
Universidad de Valladolid, Facultad de Ciencias  
Paseo Belén 9, 47011, Valladolid, Spain

**L.P. Lara**

Department of Physics  
Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura  
Universidad Nacional de Rosario, Argentina

Copyright © 2014 J.J. Alvarez, M. Gadella and L.P. Lara. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

### Abstract

We introduce a numerical method to obtain approximate eigenvalues for some problems of Sturm-Liouville type. As an application, we consider an infinite square well in one dimension in which the mass is a function of the position. Two situations are studied, one in which the mass is a differentiable function of the position depending on a parameter  $b$ . In the second one the mass is constant except for a discontinuity at some point. When the parameter  $b$  goes to infinity, the function of the mass converges to the situation described in the second case. One shows that the energy levels vary very slowly with  $b$  and that in the limit as  $b$  goes to infinity, we recover the energy levels for the second situation.

**Mathematics Subject Classification:** 81-08, 81Q10

**Keywords:** Self adjoint extensions, quantum systems with variable mass, Sturm Liouville systems, numerical methods for approximate eigenvalues

## 1 Introduction

In this paper, we introduce a method to evaluate eigenvalues for the some problems of Sturm-Liouville type. As this method should be valid in order to obtain the energy levels of some Schrödinger equations whose solutions should fulfil given boundary conditions, we were looking for an explicit example of application. One of the fields of research in physics which has recently received some attention is the study of quantum systems with variable mass[6]. Situations combining a one dimensional system with a mass jump at one point plus a point potential at the same point have been already studied by our group[3, 8, 4]. However, our principal aim in these case was looking for solvable or quasi solvable systems with resonances and the systems under the study did not have bound states. The simple system having a purely discrete spectrum capable to bear a non constant mass seems to be the one dimensional infinite square well. This is the reason why we have chosen this example in our discussion along the present paper.

As is well know, the Hamiltonian of the one dimensional infinite square well has the form (with  $\hbar = 1$ )

$$H = \frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad \text{with} \quad V(x) = \begin{cases} \infty & \text{if } x < -c \\ 0 & \text{if } -c < x < c \\ \infty & \text{if } x > c \end{cases} . \quad (1)$$

In passing, we comment that this Hamiltonian is not self adjoint unless we fix some boundary conditions at the points  $-c$  and  $c$  for the wave functions in its domain. As a matter of fact,  $H$  defined on its minimal domain has deficiency indices  $(2, 2)$  so that its self adjoint extensions are determined by four independent real parameters. A study of these self adjoint extensions and their corresponding energy levels is available in the literature[7].

When we introduce a non constant mass a problem arises connected with the non commutation between the position and the momentum. In order to avoid it, one should replace the usual kinetic term in the Hamiltonian  $K = p^2/(2m)$  by the following symmetric expression:

$$K = -\frac{1}{2} \left\{ m^\alpha(x) \frac{d}{dx} m^\beta(x) \frac{d}{dx} m^\alpha(x) \right\} , \quad (2)$$

with with  $2\alpha + \beta = -1$ . Thus, our Hamiltonian should be  $H = K + V(x)$  with  $K$  as in (2) and  $V(x)$  as in (1).

However, this situation is too general and we should make one choice being both simple and natural. The choice that looks more natural is probably  $\alpha = 0, \beta = -1$ . The connection of this choice with the conservation of Galilei invariance was discussed by Levi-Leblond[11] and on this Galilei invariance is already a basis to make it.

Assume first that the mass is a differentiable function  $m(x)$  of the position. Then after a simple calculation, one shows that the time independent Schrödinger equation  $H\varphi = E\varphi$  is given inside the interval  $[-c, c]$  by

$$\frac{1}{m(x)} \varphi''(x) - \frac{m'(x)}{m^2(x)} \varphi'(x) + 2E\varphi(x) = 0 \tag{3}$$

and zero otherwise. Here, we may use the standard boundary condition at the borders:  $\varphi(-c) = \varphi(c) = 0$  to obtain solutions of the eigenvalue problem.

A second possibility is the assumption of a constant mass except for a discontinuity at some point, say  $a \in [-c, c]$  (we may take  $a = 0$ , but also there is no need for the interval to be  $[-c, c]$ , it may also be  $[0, c]$  or any other). In this case, along boundary conditions at the border, we should give matching conditions at the point  $a$ . Here, we use again  $\varphi(-c) = \varphi(c) = 0$ . Then, we need to fix the matching conditions at  $a$  (we henceforth assume that  $a = 0$  for simplicity). In a previous paper[3], it was shown that the choice  $\alpha = 0, \beta = 1$  along the additional condition

$$\frac{1}{m_2} \varphi'(0+) - \frac{1}{m_2} \varphi'(0-) = 0, \tag{4}$$

where  $\varphi'(0+)$  and  $\varphi'(0-)$  are the right and left limits of the wave function  $\varphi(x)$  at the origin, gives the following expression for the kinetic term  $K$ :

$$K = \begin{cases} -\frac{1}{2m_1} & \text{if } x < 0 \\ -\frac{1}{2m_2} & \text{if } x > 0 \end{cases} . \tag{5}$$

The problem of the self adjoint extensions of (5) was discussed earlier[12]. In order to fix a proper self adjoint choice for our Hamiltonian, in addition to the boundary values at the borders we need to settle matching conditions at the point at which we have the mass discontinuity. These conditions are relations between the left and right limits of the function and its first derivative. Then along (4), we can use the continuity of the wave function. The resulting matching conditions can be written as

$$\begin{pmatrix} \varphi(0+) \\ \varphi'(0+) \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \varphi(0-) \\ \varphi'(0-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{m_2}{m_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi(0-) \\ \varphi'(0-) \end{pmatrix} . \tag{6}$$

The self adjointness of the Hamiltonian is determined by both, boundary and matching conditions. In particular, matching conditions are determined by the matrix  $T$  in (6), which should verify the following relation[8, 4]:

$$M_1 = T^\dagger M_2 T, \quad M_i = \frac{1}{2m_i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \quad (7)$$

$T^\dagger$  denotes the adjoint matrix of  $T$ . The general solution of the Schrödinger equation under the above conditions is given by

$$\varphi(x) = A \sin(k_1(c+x))H(-x) + B \sin(k_2(c-x))H(x), \quad (8)$$

where  $A$  and  $B$  are constants,  $H(x)$  is the Heaviside step function and

$$k_i = \sqrt{2m_i E}, \quad i = 1, 2. \quad (9)$$

Note that  $\varphi(-c) = \varphi(c) = 0$  so that the required boundary conditions are satisfied. The given (6) matching conditions applied to (8) give:

$$A \sin(k_1 c) = B \sin(k_2 c) \implies B = A \frac{\sin(k_1 c)}{\sin(k_2 c)} \quad (10)$$

$$\frac{A k_1}{m_1} \cos(k_1 c) = \frac{B k_1}{m_2} \cos(k_2 c) \implies$$

$$\frac{k_1}{m_1} \cos(k_1 c) = \frac{k_1}{m_2} \frac{\sin(k_1 c)}{\sin(k_2 c)} \cos(k_2 c). \quad (11)$$

This and (9) give the following transcendental equation for  $E$ :

$$\sqrt{m_2} \tan[c\sqrt{2m_2 E}] = \sqrt{m_1} \tan[c\sqrt{2m_1 E}]. \quad (12)$$

It is noteworthy that equation (12) gives the energy levels for any one dimensional infinite square well of width  $2c$  with a jump of mass at the middle point and masses  $m_1$  and  $m_2$  (with jump  $\Delta := m_2 - m_1$ ), because of this system is invariant under translation. Therefore, formula (12) given the energy levels is valid if the interval were  $[0, 2c]$  instead  $[-c, c]$ , for instance. We shall take into account this fact in our explicit calculations.

This paper is organized as follows: In Section 2, we introduce the method for obtaining the energy levels and in Section 3, we compare our method to other methods. In Section 4, we apply our method to a situation in which the dependence of the mass with the position is differentiable. Furthermore, the function of mass depends on an additional parameter  $b$  such that in the limit  $b \mapsto \infty$  we obtain the coordinate dependence of the mass given by  $m(x) = m_1 H(-a) + m_2 H(x)$ , i.e., a constant mass except for a discontinuity

at one point, say  $a$ . This is interesting as the energy levels for the continuous distribution of mass converge to the energy levels for the limit case.

## 2 A Method for the Determination of the Eigenvalues

Along the present section, we shall develop a method to solve numerically the equations that will arise in the problem described here. These equations are of the of the following type:

$$y''(x) = F_\lambda(x, y(x), y'(x)). \quad (13)$$

This equation depends explicitly of the eigenvalue  $\lambda$  to be determined, as is exactly the case of the (time independent) Schrödinger equation. Here,  $x \in I \equiv [a, b]$ . We assume that the following conditions hold:

$$c_1 y(a) + c_2 y'(a) = c_3, \quad d_1 y(b) + d_2 y'(b) = d_3, \quad (14)$$

where the constants  $c_k$  and  $d_k$ ,  $k = 1, 2, 3$  are known. Note that this problem is just a generalization of Sturm-Liouville.

A variety of methods for solving this problem ((13) with (14)) exist. One of the most efficient is the Differential Transformation Method (DTM)[9, 1, 14, 5, 15]. This method is beautiful, elegant and, in many cases, effective. However, its practical implementation requires numerical determination of roots, a calculation which is sometimes tedious, particularly in the case of non-linear equations.

We are introducing another method to solve numerically ordinary differential equations, which has been suggested to us by our experience in the use of the software Mathematica. A version of this method was designed to approximate periodic solutions [13].

We hereby describe the method and use it for the numerical study of the infinite square well with a variable mass.

Our method is based in the approximation of the solution  $y(x)$  by means of Taylor polynomials whose order depends on the desired degree of accuracy. In order to perform the expansion on the finite Taylor series, we need to impose the condition that  $F_\lambda(x, y, y')$ , where  $\lambda$  denotes a parameter, be analytic or at least differentiable up to the necessary order on the interval  $[a, b]$ . Contrary to the usual procedure in the DTM, we do not determine algebraically the coefficients in the Taylor polynomial, but instead we calculate them analytically, often with the help of a software for symbolic calculus.

The second difference between our method and the DTM can be explained as follows: when searching for solutions to ODE with given boundary conditions we often find periodic solutions which cannot be accurately approximated



by a unique Taylor polynomial on the whole integration interval. When solving (13) subject to conditions (14), this problem has the following cure:

Let us divide the integration interval  $[a, b]$  into  $m$  subintervals with the same length by taking the points  $x_k = a + kh$  with  $h = (b - a)/n$ ,  $k = 1, 2, \dots, m$ . Here the number  $m$  of subintervals depends on the precision we want. Then, let us write (13) as the following system:

$$y'(x) = z(x), \quad z'(x) = F_\lambda(x, y(x), y'(x)). \quad (15)$$

Then on each interval  $(x_k, x_{k+1})$ , we approximate the functions  $y(x)$  and  $z(x)$  by respective Taylor polynomials as follows:

$$y_n(x) = \sum_{j=0}^n \frac{1}{j!} y^{(j)}(x_k)(x - x_k)^j,$$

$$z_n(x) = \sum_{j=0}^n \frac{1}{j!} z^{(j)}(x_k)(x - x_k)^j, \quad (16)$$

where we determine the derivatives  $y^{(j)}$  and  $z^{(j)}$  by means of (15), i.e.,  $y^{(1)}(x) = z(x)$ ,  $y^{(2)}(x) = F_\lambda(x, y(x), z(x))$ ,  $y^{(3)}(x) = \partial F_\lambda / \partial x + z \partial F_\lambda / \partial y + F_\lambda(\partial F_\lambda / \partial z)$  and so on up to the desired derivative. Similarly, we obtain the successive derivatives of  $z(x)$ .

Then, starting with the first equation in (15), we obtain the initial values to obtain  $y_n(x)$  and  $z_n(x)$  on the interval  $[x_0, x_1]$ , which are parameterized by the eigenvalue  $\lambda$ . Then, we know the values  $y_n(x_1)$  and  $z_n(x_1)$  which allow us to construct  $y_n(x)$  and  $z_n(x)$  on the interval  $[x_1, x_2]$  and so on.

After obtaining the approximation for the last interval, we note that the second equation in (13) gives us the condition  $d_1 y(x_m) + d_2 z(x_m) = d_3$  with  $x_m = b$ , which gives an algebraic equation in  $\lambda$ . Then, the roots of this equation are the eigenvalues we search for.

Once we have chosen one of these eigenvalues, the segmentary solutions are well defined. The values of  $n$  and  $m$  should be determined by practice depending on the desired accuracy.

For the above calculations we use the software Mathematica.

### 3 Comparison with the Results Obtained by other Authors

Along the present section, we compare our results to the results obtained by the DTM method as introduced in some papers[9, 1]. Take for instance a

problem considered by Chao Kuang Chen and Shing Huei Ho[9], the differential equation with boundary conditions given by

$$y''(x) + \lambda x^2 y(x) = 0, \quad y(0) = y(1) = 0. \tag{17}$$

Here, the solution is given by

$$y(x) = \frac{\Gamma(1/4)}{2 \times 2^{1/4} \lambda^{1/4} \sqrt{\pi}} (D_{-1/2}((-1 + i) \lambda^{1/4} x) - D_{-1/2}((1 + i) \lambda^{1/4} x)), \tag{18}$$

where  $D_\nu(x)$  is the parabolic cylindrical function<sup>1</sup> of index  $\nu$  and  $\Gamma(x)$  is the Gamma function. Starting with (18) and the roots of the transcendental equation  $y(0) = 1$ , we obtain numerical values for the eigenvalues  $\lambda_{exact}$ . Note that Taylor expansion of (18) on a neighborhood of zero has only the odd powers  $x^{4k-3}$  with  $k = 1, 2, \dots$

Now, let us go back to the method introduced in the previous section. Take the interval  $[0, 1]$  and divide it into only one interval, so that  $m = 0$ . Then, let us determine the solutions of (17) for different values of  $n$ . First of all, let us determine the the smallest eigenvalue. Its “exact” value is 30.9333. Then, we obtain

$n$	13	17	21	25	29
$\lambda_n$	30.2370	30.9921	30.9303	30.9335	30.9333
$\Delta y$	—	0.75	-0.062	0.0032	-0.0002
$\epsilon_r \%$	2	$2 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$

Table 1

Here,  $\Delta y$  denotes the differences  $\lambda_{17} - \lambda_{13}$ , then,  $\lambda_{21} - \lambda_{17}$  and so on and  $\epsilon_r \%$  is the modulus of the relative difference between  $\lambda_{exact}$  and the eigenvalue  $\lambda_n$  as given in the above table. These results are equivalent to those obtained by Chao Kuang Chen and Shing Huei Ho[9]. In order to implement our method, we have used Mathematica and the CPU times in a regular computer are less than a second. Since the exact solution is known, we can estimate the difference between solutions by means of the error parameter, here named as error for simplicity, defined as

$$D_n = \int_0^1 (y_{exact}(x) - y_n(x))^2 dx. \tag{19}$$

<sup>1</sup>This is a solution of the equation  $y'' + (\nu + 1/2 - x^2/4)y = 0$ , see [2].

For instance, for the first eigenvalue, according to Table 1, we obtain:  $D_{13} = 2 \cdot 10^{-5}$  and  $D_{12} = 4 \cdot 10^{-10}$ . We see that this error is quite small.

Using (16), we can obtain the approximate eigenfunction for  $n = 21$ , which is

$$y = x - 1.54652 x^5 + 0.664364 x^9 - 0.131724 x^{13} + 0.0149789 x^{17} - 0.0011031 x^{21}, \quad (20)$$

while the result obtained in the before mentioned paper[9] was:

$$y = x - 1.5465 x^5 + 0.664351 x^9 - 0.13172 x^{13} + 0.0149783 x^{17} - 0.00110305 x^{21}. \quad (21)$$

Here, the authors obtain  $D_{21} = 5 \cdot 10^{-10}$  a result that our method slightly improves.

For the second eigenvalue, whose “exact” result is 139.530, we obtain:

$n$	29	33	37	41	45
$\lambda_n$	141.889	139.315	139.549	139.529	139.530
$\Delta y$	—	-2.6	0.21	-0.02	0.001
$\epsilon_r \%$	$2 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$

Table 2

Here, the errors are given by  $D_{29} = 1 \cdot 10^{-5}$  and  $D_{45} = 2 \cdot 10^{-14}$ .

Now, we want to estimate the third eigenvalue. In the DTM, we need to increase the degree  $n$  of the polynomial. With our method, we can make use of the numbers  $m$  and  $n$  to obtain a sufficient accuracy for a bigger number of eigenvalues. For instance, if we take  $m = 10$  and  $n = 10$ , we can obtain the values of the seven first eigenvalues of a reasonable precision. In the next table, we give the errors that our method shows in relation with the exact results for the seven first eigenvalues:

eigenvalue	1	2	3	4	5	6	7
$\epsilon_r \%$	$2 \cdot 10^{-4}$	$7 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$6 \cdot 10^{-1}$

Table 3

Finally, we shall compare our method to the standard method of the determination of the eigenvalues by the method of the polynomial[10]. This is a numerical resolution of equation (15) by replacing the second derivative by an approximation by finite divided and centered differences. This generates a homogenous system of equations. The expansion of the determinant of the coefficient matrix produces a polynomial such that its real roots are the desired eigenvalues.

For the first eigenvalue, the method of the polynomial gives the following results:

$n$	200	500	1000
$\lambda$	30.9324	30.9332	30.9333
$\epsilon_r \%$	$3 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$ .

Table 4

In Table 4,  $n$  is the subinterval given in the divided difference. The corresponding results for the second eigenvalue are:

$n$	200	500	1000
$\lambda$	139.510	139.527	139.529
$\epsilon_r \%$	$1 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-4}$ .

Table 5

From the results of Table 4 and Table 5, we conclude that in order to obtain the level of precision reached in the results given in Table 1 and Table 2, the polynomial method requires a large number of nodes than in the method proposed in Section2. In addition, CPU times are significantly higher. Furthermore, if we want to find the eigenvalues next to the second, we need to add more nodes and consequently the CPU time.

As a conclusion, we have introduce an alternative to calculation to powerful methods such that, by using the software of symbolic calculus (we have used Mathematica), it shows a really simple implementation that can be even useful for a beginner. In addition, it has the advantage that the few former eigenvalues can be obtained with a Taylor polynomial of rather low degree and small CPU times.

## 4 Infinite Square Well with Variable Mass

Along this section, we shall apply the numerical formalism here introduced in the study of the energy levels of the infinite square well with a variable mass. We consider two possibilities:

i.) A mass jump as described in the Introduction. If the mass jump is located at the point  $a$ , the mass function in terms of the position can be written, inside the interval with zero potential as  $m_\infty(x) = m_1H(a-x) + m_2H(x-a) = m_1 + (m_2 - m_1)H(x-a)$ , where  $H(\omega)$  is the Heaviside step function.

ii.) As a previous exercise, we shall approximate the mass jump by a differentiable mass function  $m_b(x)$ , depending on a parameter  $b$ , with the condition

$$\lim_{b \rightarrow \infty} m_b(x) = m_\infty(x). \quad (22)$$

Thus, let us study first the Schrödinger equation (3) in which the well interval has been chosen to be  $[0, 1]$  instead of  $[-1/2, 1/2]$ ,  $c = 1$  for simplicity in our calculations. Note that the energy levels should be invariant under space translations, so that our results will be equally valid for any interval of width 1.

Now, we construct the function of mass  $m_b(x)$  as follows: Take the function

$$g_b(x) := \frac{1}{1 + e^{-b(x-1/2)}}. \quad (23)$$

Observe that

$$\begin{aligned} \text{if } x > 1/2 & \quad \lim_{b \rightarrow \infty} g_b(x) \mapsto 1 \\ \text{if } x = 1/2 & \quad g_b(1/2) = 1/2 \\ \text{if } x < 1/2 & \quad \lim_{b \rightarrow \infty} g_b(x) \mapsto 0. \end{aligned} \quad (24)$$

Therefore,

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{1 + e^{-b(x-1/2)}} = H(x - 1/2) \quad (25)$$

pointwise. Consequently, if we define

$$m_b(x) := m_1 + \frac{m_2 - m_1}{1 + e^{-b(x-1/2)}} \quad (26)$$

then,

$$\lim_{b \rightarrow \infty} m_b(x) = m_1 + (m_2 - m_1)H(x - 1/2) = m_\infty(x). \quad (27)$$

Now, take  $m_b(x)$  as defined in (26) and use it as a particular realization of  $m(x)$  in the Schrödinger equation (3). We intend to solve numerically this equation for given values of the parameters. Our first choice is  $m_1 = 1$ ,  $\Delta := m_2 - m_1 = 1$  and  $b = 10$ . We have to use the boundary values of wave functions at the points 0 and 1. To be consistent with the comments in the Introduction, these boundary values should be  $\varphi(0) = \varphi(1) = 0$ . Then, we determine the solutions using the method described in Sections 2 and 3.

Then, in order to initiate the iterative process as described in equation (16), let us take the initial values  $y(0) = \varphi(0) = 0$  and  $z(0) = \varphi'(0) = 1$  (observe that the value of the derivative  $\varphi'(0)$  can be somehow arbitrarily chosen as it affects to the norm of the wave function only). Following Section 2, results depend on two parameters:  $n$  the chosen degree of the polynomial and  $m$  the number of intervals which divide the integration domain (here  $[0, 1]$ ).

In the next table, we show as an example the values of the first  $E_1$  and the fifth  $E_5$  eigenvalues of the energy in terms of the parameters  $n$  and  $m$ . The first column gives the values of  $n$  and the first row the values of  $m$ .

Thus, for  $E_1$ , we have

$n \setminus m$	50	60	80	100	300	600
1	3.5540	3.5417	3.52712	3.51878	3.49804	3.49321
2	3.48446	3.48567	3.48690	3.48745	3.48837	3.48845
3	3.48841	3.48844	3.48847	3.48847	3.48848	3.48848.

Table 6

For  $E_5$  the values we have obtained are

$n \setminus m$	50	60	80	100	300	600
1	91.6682	89.3794	87.1101	86.0380	84.1501	83.8877
2	81.1658	81.8829	82.6441	83.0145	83.6271	83.6867
3	83.6004	83.6506	83.6860	83.6970	83.7064	83.7066

Table 7

In both tables, we can appreciate the convergence either if we fix  $n$  and increase  $m$  or viceversa. As one could have expected, the bigger  $n$  the smaller the number of  $m$  to achieve similar accuracy.

If we take the resulting values for  $n = 3$  and  $m = 600$  as reference values, then we may compare the percentual relative difference between the reference value and those obtained for  $m = 50$ . The results are given in the following table:

$n$	$E_1$	$E_5$
1	2 %	10 %
2	0.1 %	3 %
3	0.001 %	0.1 %.

Table 8

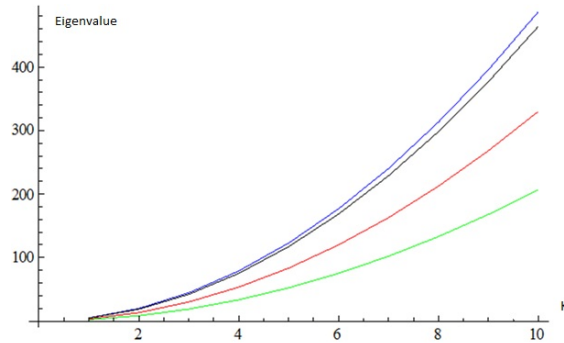


Figure 1: Energy levels for different values of  $\Delta$ .

This shows that for the five first eigenvalues of the energy, at least, a good choice could be  $n = 3$ ,  $m = 50$ . It is also interesting to remark that the approximation given by formula (28) below gives 6% for  $E_1$  and 2% for  $E_5$ . This choice gives CPU times lower than two seconds in a computer AMD Athlon II X2 250 3.00 GHz, RAM 4 GB using Mathematica software.

#### 4.1 Dependence of the mass on the parameter $b$ .

Next, we analyze the behavior of the energy spectrum under changes on the values of the mass parameters. Take again  $m_1 = 1$  and let us evaluate the ten first energy levels for different values on the difference  $\Delta = m_2 - m_1$ . We have moved  $b$  along the interval  $(0.05, 200)$  and along  $(0.0, 3.0)$ . The dependence of the energy levels does not depend significantly on  $b$  within the considered interval. Contrarily, the variation of the energy levels with  $\Delta$  behave according to the law

$$E_k \approx \frac{(k\pi)^2}{2 + \Delta}, \quad k = 1, 2, \dots, 10, \quad (28)$$

with a relative error smaller than 8%.

In Figure 1, we show the value of the energy levels for different values of  $\Delta$ . The blue curve corresponds to  $\Delta = 0$  (constant mass). Below, we plot the curves for  $\Delta = 0.1, 1.0$  and  $3.0$ . Curves obtained with formula (28) match with curves obtained numerically. This Figure remains essentially unaltered if we modify the values of  $b$  from 0.05 to 50. Although the energy spectrum is discrete this continuous representation of the energy levels seem to be very explicative by itself.

### 4.2 Constant mass with jump at $x = 1/2$ .

We discuss here the model of the infinite square well with a mass dependence on the position given by  $m_\infty(x)$  as in (27). The equation we have to solve here is (12) with  $c = 1/2$ . Let us choose  $m_1 = 1$ . Then, the particular form of (12) becomes:

$$\sqrt{m_2} \tan \left[ \sqrt{m_2} \sqrt{\frac{E}{2}} \right] = \tan \left[ \sqrt{\frac{E}{2}} \right] \tag{29}$$

In the simple case in which we choose  $m_2 = n^2$ , i.e., the square of a natural number, this equation is explicitly solvable and gives:

$$E_k = 2(k\pi)^2, \quad k = 0, 1, 2, \dots \tag{30}$$

In addition, if we choose the mass jump  $\Delta = m_2 - m_1$  to be smaller than three, the energy levels can be approximated quite reasonably by the following formula:

$$E_k^* = \frac{(k\pi)^2}{2 + \Delta}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \tag{31}$$

Take, for instance  $\Delta = 1$  ( $m_2 = 2$ ) and compare the roots of (31) to the roots obtained from (29). We compare these results on Table 9, in which  $E_r\%$  determines the percentual relative variation of  $E_k^*$  with respect to  $E_k$ :

$k$	1	2	3	4	5	10	15	20
$E_k$	3.5846	12.909	31.602	52.937	85.448	341.514	328.987	1362.00
$E_k^*$	3.290	13.159	29.609	52.638	82.247	328.99	740.22	1316.00
$E_r\%$	8	2	6	1	4	4	4	3

Table 9

Another example is given in Table 10. Take the first eigenvalue of equation (29) as given by (31). This eigenvalue is  $E_1^* = 3.5846$ . Let us use the method described in Section 2 for the determination of the eigenvalue of (3) with mass dependence in the coordinate given by (26) and  $\Delta = m_2 - m_1 = 1$ . We use the integration parameters  $n = 3$  and  $m = 600$ . On Table 10, we show the dependence of the value of the first energy level  $E_1$  in terms of the parameter  $b$  in (26). We also include the relative error,  $\varepsilon_r\%$  defined above.

The results are:

$b$	10	50	100	200	500
$E_1$	3.48847	3.57912	3.5835	3.58423	3.58460
$\varepsilon_r\%$	3	$2 \cdot 10^{-1}$	$3 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	0



Table 10

We note how close are the results obtained by our method to the empirical results given by formulas (29) and (31).

## 5 Concluding Remarks

We have proposed one method to obtain the energy levels of a given Hamiltonian with purely discrete spectrum. We have applied it to calculate the energy levels of the one dimensional infinite square well with variable mass. The mass is written as a function of position. We have considered two possibilities, one in which the mass is a continuous and even differentiable function of the position and in the other the mass is constant except for a jump at the middle of the well. In addition, the continuous function of mass depends on one parameter so that when this parameter goes to infinite the function of mass goes to the second case of constant mass with a jump. Our numerical calculations show that also the energy levels for the continuous mass case go to the energy levels for the mass jump case.

## Acknowledgements

Partial financial support is acknowledged to the Spanish Ministry of Science and Technology (Project MTM2009-10751) and the Project UNR-ING 195 (Argentina).

## References

- [1] I.H. Abdel-Halim Hassan, Different applications for the differential transformation in the differential equations, *Applied Math. Comp.*, 129 (2002), 183-201.
- [2] M. Abramovich, I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, 1972.
- [3] J.J. Alvarez, M. Gadella, F.J.H. Heras, L.M. Nieto, A one-dimensional model of resonances with a delta barrier and a mass jump, *Phys. Lett. A*, 373 (2009), 4022-4027.
- [4] J.J. Alvarez, M. Gadella, L.M. Nieto, A study of resonances in a one dimensional model with singular Hamiltonian and mass jump, *Int. J. Theor. Phys.*, 50 (2011), 2161-2169.

- [5] F. Ayaz, Solutions of the system of differential equations by differential transform method, *Applied. Math. Comp*, 147 (2004), 547-567.
- [6] G. Bastard, Super lattice band-structure in the envelope-function approximation, *Phys. Rev. B*, 24 (1981), 5693-6597; O. Von Roos, Position effective masses in semiconductor theory, *Phys. Rev. B*, 27 (1983), 7547-7552; Q. Zhu, H. Kroemer, Interface connection rules for effective-mass wave functions at an abrupt heterojunction between two different semiconductors, *Phys. Rev. B*, 27 (1983), 3519-3527; R.A. Morrow, K.R. Brownstein, Model effective-mass Hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions, *Phys. Rev. B*, 30 (1984), 678-680; R.A. Morrow, Establishment of an effective mass Hamiltonian for abrupt heterojunctions, *Phys. Rev. B*, 35 (1987), 8074-8079; J. Thomsen, G.T. Einevoll, P.C. Hemmer, Operator ordering in effective-mass theory, *Phys. Rev. B*, 39 (1989), 12783-12788; G.T. Einevoll, P.C. Hemmer, J. Thomsen, Operator ordering in effective-mass theory for heterostructures. I. Comparison with exact results for superlattices, quantum wells, and localized potentials, *Phys. Rev. B*, 42 (1990), 3485-3496; N. Moiseyev, R. Lefebvre, Continuity conditions for the wave function of a particle with a position-dependent mass in a laser field, *Phys. Rev. A*, 64 (2001), 052711; R. Koç, M. Roca, G. Şahinoğlu, Scattering in abrupt heterostructures using a position dependent mass Hamiltonian, *Eur. Phys. J. B*, 48 (2005), 583-586; A. Ganguly, S. Kuru, J. Negro, L.M. Nieto, A study of the bound states for square potential wells with position-dependent mass, *Phys. Lett. A*, 360 (2006), 228-233; S. Cruz, J. Negro, L.M. Nieto, On position-dependent mass harmonic oscillators *J. Phys.: Conf. Ser.*, 128 (2008), 012053.
- [7] G. Bonneau, J. Faraut, G. Vallent, Self adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics, *American Journal of Physics*, 69 (2001), 322-331.
- [8] M. Gadella, F.J.H. Heras, J. Negro, L.M. Nieto, Delta well with a mass jump, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 42 (2009), 465207.
- [9] Chao Kuang Chen, Shing Huei Ho, Application of Differential Transform to Eigenvalue Problems, *Applied Math. Comp.*, 79 (1996), 173-188.
- [10] S. Chapra, R. Canale, *Numerical Methods for Engineers with Programming and Software Applications*, McGraw-Hill, New York and London, 1999.
- [11] Levi-Leblond, J.M., Position-dependent effective mass and Galilean invariance, *Phys. Rev. A*, 52 (1995), 1845-1849.

- [12] M. Gadella, S. Kuru, J. Negro, *Physics Letters A*, 362 (2007), 265-268.
- [13] M. Gadella, L.P. Lara, On the determination of approximate periodic solutions of some non-linear ODE, *Applied Math. Comp.*, 218 (2012), 6038-6044.
- [14] Ming-Jyi Jang, Chieh-Li Chen, Yung-Chin Liy, On solving the initial-value problems using the differential transformation method, *Applied Math. Comp.*, 115 (2000), 145-160.
- [15] Shih-Hsiang Chang, I-Ling Chang, A new algorithm for calculating one dimensional differential transform of nonlinear functions, *Applied Math. Comp.*, 195 (2008), 799-808.

**Received: May 11, 2014**