

# POTENCIALES SINGULARES EN SISTEMAS CUÁNTICOS TRIDIMENSIONALES Y APLICACIONES FÍSICAS

Trabajo Fin de Grado en Física

Autor:

LUCÍA SANTAMARÍA SANZ

Dirigido por:

L. M. Nieto Calzada y J. M<sup>a</sup> Muñoz Castañeda

4 de julio de 2017



---

**Universidad de Valladolid**

**Facultad de Ciencias**

Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica



# Índice general

Agradecimientos	VII
Resumen	IX
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	1
1.2. Objetivos . . . . .	3
1.3. Metodología . . . . .	4
<b>2. Esfera no relativista: estados ligados</b>	<b>7</b>
2.1. Dependencia temporal . . . . .	8
2.2. Dependencia angular . . . . .	9
2.2.1. Dependencia con el ángulo $\phi$ . . . . .	10
2.2.2. Dependencia con el ángulo $\theta$ . . . . .	11
2.3. Dependencia radial . . . . .	12
2.3.1. Ecuación radial reducida . . . . .	12
2.3.2. Ecuación radial simplificada . . . . .	13
2.3.3. Finitud de la función de onda . . . . .	15
2.3.4. Continuidad de la función de onda en $r_0$ . . . . .	17
2.3.5. Discontinuidad de la derivada primera en $r_0$ . . . . .	18
2.4. Interpretación física . . . . .	19
2.5. Agujeros negros y aislantes topológicos . . . . .	26
<b>3. Scattering no relativista</b>	<b>31</b>
3.1. Scattering elástico . . . . .	31
3.1.1. Método de ondas parciales . . . . .	34
3.2. Cálculo de los desfasajes . . . . .	36
3.3. Conexión con QFT . . . . .	49
<b>4. Dos esferas no relativistas</b>	<b>51</b>
4.1. Cálculo de estados ligados . . . . .	52

4.1.1.	Potencial con $A < 0$ y $B < 0$ . . . . .	54
4.1.2.	Potencial con $A > 0$ y $B < 0$ . . . . .	58
4.2.	Cálculo de estados de scattering . . . . .	65
4.2.1.	Potencial con $A > 0$ y $B > 0$ . . . . .	65
<b>5.</b>	<b>Efecto Casimir en QFT</b> . . . . .	<b>67</b>
5.1.	Efecto Casimir . . . . .	68
5.2.	Cuantización del campo . . . . .	70
5.3.	Energía de Casimir en un cuerpo . . . . .	73
5.3.1.	Desfasajes y coeficientes del núcleo de calor . . . . .	73
5.3.2.	Cálculo de la energía . . . . .	76
5.4.	Energía de Casimir para 2 cuerpos . . . . .	77
5.4.1.	Fórmula TGTG . . . . .	77
5.4.2.	Cálculo de la energía . . . . .	80
<b>A.</b>	<b>Armónicos esféricos</b> . . . . .	<b>85</b>
A.1.	Grupo $SO(3)$ . . . . .	85
A.2.	Ecuación de Laplace en esféricas . . . . .	86
A.3.	Propiedades . . . . .	87
<b>B.</b>	<b>Funciones de Bessel</b> . . . . .	<b>91</b>
B.1.	Funciones de Bessel . . . . .	91
B.1.1.	Definiciones . . . . .	91
B.1.2.	Propiedades . . . . .	92
B.2.	Funciones de Bessel modificadas . . . . .	93
B.2.1.	Definiciones . . . . .	93
B.2.2.	Propiedades . . . . .	94

# Índice de figuras

2.1.	Distribución de regiones en el sistema. . . . .	13
2.2.	Comportamiento típico de algunas funciones de Bessel modificadas. . . . .	16
2.3.	Comportamiento de $I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)$ para $\ell = 0, 1, 2, 3$ . . . . .	20
2.4.	Configuración $1/(Ar_0) = 1,5$ (recta negra). No existen estados ligados para $\ell = 0, 1, 2, 3$ . . . . .	21
2.5.	Configuración $1/(Ar_0) = 0,2$ (recta negra). Existen estados ligados para $\ell = 0, 1, 2$ pero no para $\ell = 3$ . . . . .	22
2.6.	Comportamiento de $F_\ell(\sigma)$ para $\ell = 0, 1, 2, 3$ . La recta naranja (que corresponde a $r_0A = 8$ ) liga un estado para $\ell = 3$ mientras que la recta negra (correspondiente a $r_0A = 6$ ) no lo hace. . . . .	24
2.7.	Comportamiento del término de la izquierda en la ecuación (2.69) cuando $r_0 = 2$ (abajo) y cuando $r_0 = 1$ (arriba). La recta negra representa una configuración del sistema en la que $1/A = 1,3$ . . . . .	25
2.8.	Energía del estado ligado cuando $r_0 = 1$ (color azul) y $r_0 = 2$ (color rojo). La recta negra representa una configuración del sistema en la que $1/A = 0,9$ . . . . .	26
2.9.	$\langle r_n \rangle / R$ en función del número de estados ligados para una configuración $R = 5 \cdot 10^2, w_0 = -2$ (intensidad de $\delta$ ) y valores positivos de $w_1$ (intensidad de la $\delta'$ ) en la parte izquierda y una configuración $R = 5 \cdot 10^3, w_0 = -1/2$ (intensidad de $\delta$ ) y valores positivos de $w_1$ (intensidad de la $\delta'$ ) en la parte derecha de la imagen. Fuente: [12] . . . . .	29
3.1.	Experimento de dispersión de partículas por un blanco puntual. . . . .	32
3.2.	Distribución de regiones en el sistema. . . . .	38
3.3.	Comportamiento típico de algunas funciones de Bessel. . . . .	39
3.4.	Desfasaje entre onda incidente y dispersada. Se ha tomado $A = 1, r_0 = 1$ . . . . .	41
3.5.	Desfasaje entre onda incidente y dispersada. Se ha tomado $A = 10, r_0 = 1$ . . . . .	42
3.6.	Argumento de la arcotangente si $A = 1, r_0 = 1$ para $\ell = 1$ . . . . .	43

3.7. Comparativa del rango del argumento de la arcotangente en la expresión de $\delta_\ell$ en el caso $A = 1$ y $A = 10$ para $\ell = 0$ en la configuración $r_0 = 1$ . . . . .	43
3.8. Comportamiento acotado de la expresión del denominador de la fórmula de desfasajes $A = 1, r_0 = 1$ . . . . .	44
3.9. Comportamiento acotado de la expresión del denominador de la fórmula de desfasajes $A = 10, r_0 = 1$ . . . . .	45
3.10. Relevancia de la $A$ en el cálculo de desfasajes en el caso $\ell = 0$ y $r_0 = 1$ . . . . .	45
3.11. Desfasaje entre onda incidente y dispersada para un potencial tipo barrera. Se ha tomado $A = 1, r_0 = 1$ . . . . .	46
3.12. Desfasaje entre onda incidente y dispersada. Se ha tomado $A = 10, r_0 = 1$ . . . . .	47
3.13. Comparativa del rango del argumento de la arcotangente en la expresión de $\delta_\ell$ en el caso $A = 1, A = 10$ y $A = 100$ para $\ell = 0$ . . .	47
3.14. Relevancia de la $A$ en el cálculo de desfasajes en el caso $\ell = 0$ . . .	48
3.15. Comportamiento acotado de la expresión del denominador de la fórmula de desfasajes para un potencial tipo barrera cuando $A = 1$ y $r_0 = 1$ . . . . .	48
3.16. Comportamiento acotado de la expresión del denominador de la fórmula de desfasajes para un potencial tipo barrera cuando $A = 10$ y $r_0 = 1$ . . . . .	49
4.1. Potencial bajo estudio para dos singularidades tipo delta concéntricas. . . . .	51
4.2. Regiones de interés en las que se divide el problema. . . . .	53
4.3. Configuración de pozos pequeños $A = B = -0,5$ separados por una distancia pequeña $h = 0,05$ para distintos $\ell$ . La recta negra representa el miembro derecho de la ecuación trascendente. . . . .	55
4.4. Configuración de pozos pequeños $A = B = -0,5$ separados por una distancia grande $h = 6$ para distintos $\ell$ . . . . .	56
4.5. Configuración de pozos grandes $A = B = -8$ separados por una distancia pequeña $h = 0,2$ para distintos $\ell$ . . . . .	56
4.6. Configuración de pozos grandes $A = B = -3$ separados por una distancia grande $h = 5$ para distintos $\ell$ . . . . .	57
4.7. Distribución de estados ligados en el plano $(\alpha a)$ - $(\beta a)$ siendo $\alpha$ equivalente a la $A$ introducida en este capítulo, $\beta$ equivalente a $B$ y $a = r_2 - r_1$ la distancia entre ambas singularidades. . . . .	58

4.8. Configuración con acoplamientos de las deltas pequeños $A = -B = -0,8$ , separadas por una distancia grande $h = 8$ para distintos $\ell$ . La recta negra representa el miembro derecho de la ecuación trascendente. . . . .	59
4.9. Configuración con acoplamientos de las deltas pequeños $A = -B = -0,8$ , separadas por una distancia pequeña $h = 0,9$ para distintos $\ell$ . . . . .	60
4.10. Configuración con acoplamientos de las deltas grandes $A = -B = -5$ , separadas por una distancia pequeña $h = 0,2$ para distintos $\ell$ . . . . .	60
4.11. Configuración con acoplamientos de las deltas grandes $A = -B = -5$ , separadas por una distancia grande $h = 6$ para distintos $\ell$ . . . . .	61
4.12. Configuración pozo-barrera con acoplamientos de las deltas grandes $A = -B = -3$ , separadas por una distancia grande $h = 5$ para distintos $\ell$ en función de la energía. . . . .	61
4.13. Configuración pozo-pozo con acoplamientos de las deltas grandes $A = B = -3$ , separadas por una distancia grande $h = 5$ para distintos $\ell$ en función de la energía. . . . .	62
4.14. Configuración pozo-pozo con acoplamientos de las deltas pequeños $A = -B = -0,2$ , separadas por una distancia variable pequeña $h$ para $\ell = 0$ . . . . .	62
4.15. Configuración pozo-pozo con acoplamientos de las deltas pequeños $A = -B = -0,2$ , separadas por una distancia variable grande $h$ para $\ell = 0$ . . . . .	63
4.16. Configuración pozo-barrera con acoplamientos de las deltas variables pequeños $A = -B$ , separadas por una distancia pequeña $h = 0,7$ para $\ell = 0$ . . . . .	63
4.17. Configuración pozo-barrera con acoplamientos de las deltas variables pequeños $A = -B$ , separadas por una distancia grande $h = 9$ para $\ell = 0$ . . . . .	64
4.18. Configuración pozo-barrera con acoplamientos de las deltas variables grandes $A = -B$ , separadas por una distancia grande $h = 9$ para $\ell = 0$ . . . . .	64
4.19. Configuración pozo-barrera con acoplamientos de las deltas variables grandes $A = -B$ , separadas por una distancia pequeña $h = 0,3$ para $\ell = 0$ . . . . .	65
5.1. Fuerza atractiva entre placas. Hendrik Casimir. . . . .	69
5.2. Experimento de Lamoreaux. . . . .	70
5.3. Parametrización de los potenciales. Se toman dos puntos en el interior de los cuerpos. El cuerpo A (B) se parametriza con un radiovector $\vec{r}_A$ ( $\vec{r}_B$ ) desde el punto $P_A$ ( $P_B$ ). El vector $\vec{d}$ conecta ambos puntos. . . . .	79

5.4. Energía de Casimir para dos esferas singulares no concéntricas en función de la distancia $d$ entre ellas en un intervalo $0 \leq r_1, r_2 \leq 0,1d$ .	81
5.5. Energía de Casimir para dos esferas singulares no concéntricas en función de la distancia $d$ entre ellas en un intervalo $0,4d \leq r_1, r_2 \leq 0,5d$ .	82
A.1. Forma de los armónicos esféricos de orden más bajo.	88



# Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a mis padres y a mi hermana el apoyo y confianza en mi trabajo recibidos todos estos años. Muchas gracias por vuestra ayuda, los consejos, los valores que me habéis enseñado y los medios que siempre me habéis facilitado para que pudiera llegar aquí.

Me gustaría dar las gracias a mis tutores, Luis Miguel Nieto y José María Muñoz, por la dedicación y el esfuerzo prestados durante estos meses. Gracias a su orientación y sus explicaciones he podido introducirme en el ámbito de la investigación científica, motivo por el cual les estoy muy agradecida. También por darme la oportunidad de colaborar y aprender con ellos durante estos dos últimos años.

Agradecer a mis amigos haberme acompañado y animado en esta etapa. Gracias por todo el cariño que me habéis mostrado.

Gracias también a los profesores de la Universidad de Valladolid por habernos formado como físicos durante estos cuatro años. Por último, agradecer al Ministerio de Educación, Cultura y Deporte la concesión de la Beca de Colaboración.

Gracias a todos.



# Resumen

El presente trabajo pretende abordar el análisis de un problema de mecánica cuántica con interés por sus potenciales aplicaciones en física de materiales (en especial aislantes topológicos) y en física de agujeros negros.

Fundamentalmente se trata de resolver la ecuación de Schrödinger (caso no relativista) en tres dimensiones espaciales (3D) para un potencial singular con simetría radial del tipo

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

Interesan tanto sus estados ligados (interpretados como estados de borde en un aislante topológico y como microestados de borde en el horizonte de sucesos de un agujero negro cuántico. El efecto túnel en este tipo de sistemas puede ser interpretado como la radiación de Hawking), como los de scattering (permitirán conectar los cálculos no relativistas con la teoría cuántica de campos).

En este TFG habrá ocasión de desarrollar una tarea bastante transversal, usando muchas de las técnicas aprendidas en el Grado, aplicadas a situaciones de interés en mecánica cuántica, teoría de campos y física de materiales.



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación

La teoría cuántica de campos (QFT) surgió como un intento de unir la relatividad especial y la mecánica cuántica ante la imposibilidad de que la ecuación de onda de Schrödinger<sup>1</sup> fuera compatible con la relatividad. Varios de los principales problemas de la mecánica cuántica es que no puede explicar procesos en los que varía el número de partículas, aparecen densidades de probabilidad negativa, soluciones inestables con energía negativa o violación de causalidad (probabilidad de encontrar partículas propagándose fuera del cono de luz). La QFT permite explicar estos problemas mediante la introducción de espacios de un número arbitrario de partículas (*espacios de Fock*), la suposición de que existen *antipartículas* con energía negativa y la visión en la que las partículas se propagan fuera del cono de luz de forma indistinguible a la de las antipartículas que van en dirección contraria y por ello, la cancelación de las amplitudes de ambos procesos anulan la probabilidad de encontrarlas fuera del cono, resolviendo la causalidad.

A principios del siglo XX científicos como Heisenberg, Pauli, Fock y Oppenheimer cuantizaron el campo clásico para trabajar con las ecuaciones de ondas relativistas sin interpretarlas como funciones de onda (*segunda cuantización*). Los problemas de las divergencias que surgieron con estas teorías se resolvieron en los años 40 cuando Schwinger, Dyson, Feynman y Tomonaga propusieron las técnicas de renormalización. Gracias a ello se desarrolló la electrodinámica cuántica (QED) y unos años más tarde las teorías gauge impulsadas por Yang y Mills.

---

<sup>1</sup>Fue el primero en tantear lo que se conoce actualmente como ecuación de Klein-Gordon pero no era compatible con la estructura hiperfina del átomo de hidrógeno, por lo que tomó el límite no relativista en sus formulaciones.

La unificación de la interacción electromagnética y la débil, gracias a la introducción de la ruptura espontánea de la simetría, fue llevada a cabo por Glashow, Salam y Weinberg en los 60. A partir de entonces se desarrolló el Modelo Estándar. En el marco de la QFT también se estudiaron renormalizaciones en teorías con simetrías rotas ('t Hooft) o la libertad asintótica de los quarks (Wilczek, Gross y Politzer). Además, la QFT permite calcular observables tales como secciones eficaces, vidas medias o momentos magnéticos con mucha precisión. Por ello ha tenido un gran éxito los últimos años para describir de manera exacta procesos subatómicos.

Actualmente, sigue habiendo un gran interés en el estudio de la QFT. Se están realizando numerosos cálculos en teoría cuántica de campos renormalizables en presencia de potenciales de fondo, correcciones a un *loop* en los casos en los que no es posible aplicar la teoría de perturbaciones, renormalización de divergencias en el cálculo de la energía del vacío combinando la sustracción y suma de términos en los desarrollos con los diagramas de Feynman de orden más bajo, cálculo de cargas inducidas debidas a los campos de fondo y modelos quirales en una dimensión que muestran cómo los efectos cuánticos de fermiones pesados pueden estabilizar solitones que no están presentes en las teorías clásicas (ver [1]).

Desde 2009 el grupo de investigación de Física Matemática de la Universidad de Valladolid ha estudiado sistemas con potenciales singulares en una dimensión para situaciones no relativistas (ver [2, 3, 4, 5, 6]). Además se ha ampliado recientemente ese trabajo a dos dimensiones de cara al estudio de materiales de gran interés tecnológico como el grafeno [7]. En este trabajo se va a generalizar el estudio a tres dimensiones, abriendo una línea de investigación que pueda explicar las propiedades de agujeros negros y ahondar en el conocimiento de la energía de Casimir que es, a día de hoy, una de las más importantes a escala nanométrica (ver [8, 9, 10, 11]) y afecta a campos como la microgravedad (posibles desviaciones de la ley de Newton), la astrofísica (explicar la constante cosmológica mediante la energía de vacío de un campo escalar cuántico), la nanotecnología (estudiar las fuerzas que aparecen en la adhesión de nanotubos en el grafeno), el efecto Schwinger (ruptura del estado de vacío al aplicar láseres intensos y estudio de la parte imaginaria de la energía de Casimir para obtener el ritmo de decaimiento del vacío del campo electromagnético cuántico<sup>2</sup>) y el tratamiento cuántico de la información en qubits superconductores (los fotones generados por efecto Casimir dinámico presentan correlaciones cuánticas dado su origen común<sup>3</sup>).

---

<sup>2</sup>En esto trabaja actualmente el equipo de Luis Rosos en el Centro de Láseres Pulsados (CLPU) en Salamanca.

<sup>3</sup>Trabajos desarrollados por el equipo de Lucas Lamata en UPV/EHU, Bilbao.

## 1.2. Objetivos

Este texto pretende ser una introducción al estudio de sistemas cuánticos en tres dimensiones. En el marco de la mecánica cuántica no relativista se calcularán los estados ligados y de scattering de potenciales esféricamente simétricos que presenten singularidades de tipo

$$A \delta(r - r_0). \quad (1.1)$$

En tres dimensiones estos potenciales singulares se pueden visualizar como una corteza esférica centrada en un punto y cuyo acoplamiento con los campos viene dado por una constante  $A$ .

El objetivo de realizar estos cálculos en el marco no relativista es aprender a conectarlos con teoría cuántica de campos. Mientras que la mecánica cuántica no relativista relaciona una partícula con una función de onda (vectores propios de la ecuación de Schrödinger cuyos autovalores son las energías del sistema) que represente la probabilidad de encontrarla en una región del espacio, la QFT se basa en una cuantización del campo continuo clásico de manera que sus estados correspondan a un colectivo de infinitas partículas idénticas que se crean y destruyen continuamente. En mecánica clásica los objetos pueden describirse como un conjunto de osciladores acoplados que macroscópicamente tendrán unas propiedades dadas por campos continuos. Un campo cuántico puede entenderse como el límite en el continuo de un conjunto de osciladores cuánticos acoplados. Las vibraciones de los átomos en los sólidos vendrán dadas por superposición de modos normales mientras que en el caso continuo la dinámica viene dada por superposición de ondas planas. Por lo tanto, un campo cuántico constituye un sistema equivalente al de un conjunto de partículas variable en número. De ahí que uno de los principales objetivos del trabajo sea estudiar el operador de Schrödinger no relativista bajo influencia de un potencial como la representación de la *torre de estados* de una partícula en una QFT. Esto tiene un gran interés actual y se aplica a la física de altas energías y en física de la materia condensada (para describir excitaciones de sistemas de muchas partículas).

También se estudiará cómo los materiales y objetos extensos pueden representarse mediante potenciales singulares. Por ejemplo, si la amplitud  $A$  que modula a la delta tiende a infinito, el potencial descrito anteriormente representa una esfera dura conductora (condiciones de Dirichlet). En cambio, si es un número finito, ese potencial de fondo representa medios semitransparentes. Los campos cuánticos interaccionarán con estos potenciales de fondo modificando su comportamiento respecto a la situación de vacío y propiciarán la aparición de magnitudes físicas medibles como la *radiación de Hawking* y la *energía de Casimir*.

Además, la resolución de estas ecuaciones permitirá asentar el conocimiento adquirido de las propiedades de funciones especiales como las de Bessel y los armónicos esféricos así como familiarizarse con el uso de herramientas de cálculo numérico que ayuden a resolver las ecuaciones trascendentes. También se aprenderá a eliminar divergencias, necesario en las teorías renormalizables con divergencias infinitas asociadas a la suma de los modos de los campos.

A través del cálculo de los estados ligados se pueden interpretar los microestados de borde de partículas cuánticas cerca de los agujeros negros (se podrá introducir el modelo *brick wall* de 't Hooft) o los estados de borde de aislantes topológicos (ver [12, 13, 14]) e introducirse en las teorías relacionadas con la radiación de Hawking. Los estados de scattering también son fuente de numerosas investigaciones en el ámbito de la teoría cuántica de campos en presencia de baños clásicos o *backgrounds* (ver [10, 11, 15, 16]).

Futuros trabajos que continúen la línea iniciada en este proyecto son estudios de las fluctuaciones de vacío y propiedades de potenciales con derivadas de deltas, generalizaciones de los cálculos a  $n$  singularidades tipo delta, introducción a estudios de campos con masa, uso de la QFT para cuantización de solitones o resolución de sistemas de partículas de  $s = 1/2$  de forma relativista con la ecuación de Dirac. A la vista de los resultados que se vayan obteniendo, se verá cuál es el camino más fructífero para futuras investigaciones.

### 1.3. Metodología

Una vez descrito el interés que suscitan los temas bajo estudio en el presente trabajo, se puede definir la estructura que se va a seguir en la exposición de los resultados. El trabajo se divide en cinco capítulos.

En el *Capítulo 2* se calcularán las soluciones de la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones espaciales para el potencial radial tipo delta anteriormente definido en (1.1). Por separación de variables se llegará a la forma final de la función de onda y, a través de la ecuación trascendente de la energía, se estudiarán los estados ligados del sistema así como los parámetros que producen cambios en la energía de los mismos.

En el *Capítulo 3* se estudiarán los estados de dispersión o scattering de ese pozo tipo delta. Siguiendo el método de ondas parciales se podrán obtener los desfases que aparecen en la onda saliente como consecuencia de la acción del potencial.



Estas expresiones serán útiles para calcular magnitudes físicas medibles en capítulos posteriores. También se comentarán las diferencias entre este potencial y la barrera tipo delta.

En el *Capítulo 4* se generalizará el estudio previo a potenciales que involucren dos deltas:

$$V(r) = A\delta(r - r_1) + B\delta(r - r_2). \quad (1.2)$$

Variando las condiciones físicas de las singularidades (su amplitud y la posición en la que están centradas) se puede llegar a un gran número de situaciones distintas. Se analizarán brevemente algunas de las más significativas haciendo hincapié en cómo la posición relativa de las deltas es fundamental para determinar el número de estados ligados del sistema.

Finalmente, en el *Capítulo 5* se analizará la conexión entre la mecánica cuántica relativista que constituye el marco de los capítulos previos y la QFT. Se usarán las expresiones de los desfases anteriormente hallados para estudiar la energía de Casimir a la que está sometido un cuerpo extenso esféricamente simétrico al hincharse o deshincharse bajo las fluctuaciones del campo (*método de los coeficientes del calor*). Asimismo se calculará la fuerza de Casimir que aparece en las configuraciones en las que haya varias singularidades esféricas (*método TGTG*).

Cada capítulo tiene una estructura autoconsistente de introducción, resultados y conclusiones a fin de facilitar la lectura.

A lo largo de todo el texto se va a trabajar con la notación simplificada que se describe a continuación a fin de facilitar los cálculos y poder conectar la teoría de campos con la mecánica cuántica. Si se tiene en cuenta la ecuación de Schrödinger para un potencial atractivo tipo delta,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_\rho^2\psi - a\delta(\rho - \rho_0)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\tau}, \quad (1.3)$$

siendo  $\nabla_\rho$  el operador laplaciano en la coordenada radial  $\rho$  y  $\tau$  una variable temporal, se puede hacer un cambio de variable  $\rho = \beta r$  que permita adimensionalizar la expresión (nótese que  $\beta$  es una variable arbitraria con dimensiones de longitud de manera que la variable nueva  $r$  es dimensional, ya que es un cociente entre posiciones). Si se aplica la regla de la cadena así como las propiedades de la delta de Dirac y se sustituye en la ecuación de Schrödinger original (1.3), se llega a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\beta^2}\nabla_r^2\psi - \frac{a}{\beta}\delta\left(r - \frac{\rho_0}{\beta}\right)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\tau}. \quad (1.4)$$

En esta ecuación, en un abuso de notación, se ha designado mediante la misma  $\psi$  a la función de onda que en realidad ahora depende de la variable  $r$ . Si se multiplica todo por  $2m\beta^2/\hbar^2$  y se opera, la ecuación se reduce a:

$$-\nabla_r^2\psi - \frac{2m a\beta}{\hbar^2} \delta\left(r - \frac{\rho_0}{\beta}\right) \psi = i\frac{2m\beta^2}{\hbar} \frac{\partial\psi}{\partial\tau}. \quad (1.5)$$

Finalmente agrupando las constantes se puede escribir la ecuación de Schrödinger de manera mucho más simple (adimensional):

$$-\nabla_r^2\psi - A\delta(r - r_0)\psi = i\frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad (1.6)$$

donde

$$A = \frac{2m a\beta}{\hbar^2}, \quad r_0 = \frac{\rho_0}{\beta}, \quad t = \frac{\hbar}{2m\beta^2}\tau \quad (1.7)$$

Si además se elige  $\beta$  como la longitud de onda Compton<sup>4</sup>, es decir, tomando  $\rho = (\hbar/mc)r$  se logra simplificar las transformaciones realizadas. Las variables nuevas se relacionan con las originales como sigue:

$$r = \frac{mc}{\hbar}\rho, \quad r_0 = \frac{mc}{\hbar}\rho_0, \quad A = \frac{2a}{\hbar c}, \quad \tau = \frac{2\hbar}{mc^2}t. \quad (1.8)$$

En lo sucesivo se empleará esta última notación, utilizando la ecuación de Schrödinger en la forma (1.6).

---

<sup>4</sup>Esta magnitud es fundamental en modelos como el de *brick wall* de 't Hooft porque al expresar la entropía de un agujero negro en función de la superficie del horizonte aparece la longitud de onda Compton. Se comentará brevemente dicho modelo en el *Capítulo 2*.

## Capítulo 2

# Esfera no relativista: estados ligados

En este capítulo se calcularán los estados ligados de la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones para el caso en el que haya una única corteza de singularidades con simetría esférica centrada en el origen. El potencial radial atractivo a estudiar será, por tanto, el siguiente:

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

La elección de un potencial atractivo no es arbitraria si se desea encontrar estados ligados (impuesta además la condición de que la energía de los mismos sea negativa). Si por el contrario el objetivo es estudiar la parte del espectro con energía positiva, hay que resolver la ecuación de Schrödinger para obtener estados de scattering (que existen siempre independientemente del signo del potencial). Dicha parte del espectro es siempre continua si el potencial en el infinito está acotado (como en este caso). Estos estados dispersados serán el objeto de estudio del *Capítulo 3*.

Se trabajará con las coordenadas adimensionales  $(\vec{r}, t)$  tal y como se ha especificado al final del *Capítulo 1*. Por tanto, el hamiltoniano del problema es el siguiente:

$$\mathcal{H} = -\nabla^2 + V(r) \quad (2.2)$$

siendo  $V(r)$  el potencial descrito anteriormente (2.1). Con esta elección, la ecuación de Schrödinger que hay que resolver toma la forma:

$$-\nabla^2 \psi(\vec{r}, t) - A \delta(r - r_0) \psi(\vec{r}, t) = i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (2.3)$$

Debido a la simetría radial del problema es más conveniente resolverla en coordenadas esféricas  $\vec{r} = (r, \theta, \phi)$ .

Haciendo el cambio de variable correspondiente la ecuación (2.3) toma la forma:

$$- \left[ \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial \phi^2} \right] - A \delta(r - r_0) \psi(\vec{r}, t) = i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (2.4)$$

Esta ecuación se puede resolver por el método de separación de variables. La solución de la función de onda tendrá una dependencia formal de tipo:

$$\psi(r, \theta, \phi, t) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) T(t). \quad (2.5)$$

En las siguientes secciones se obtendrán cada uno de estos factores por separado.

## 2.1. Dependencia temporal

Como el potencial elegido es independiente del tiempo, toda la dependencia temporal de la solución para la función de onda vendrá dada en forma de una fase. Para verlo, se aplica la separación de variables (2.5) en (2.4) y se divide a toda la ecuación resultante entre  $\psi$ , de forma que se obtenga:

$$- \left[ \frac{1}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{1}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} \right] - A \delta(r - r_0) = \frac{i}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt}. \quad (2.6)$$

El miembro izquierdo de la ecuación (2.6) no depende del tiempo mientras que el derecho solo depende de  $t$ , por lo que se llega a la conclusión de que ambos deben ser igual a una constante. Se obtiene una ecuación diferencial lineal, homogénea y de primer orden para la variable  $t$ :

$$\frac{i}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = E. \quad (2.7)$$

La constante de separación  $E$  a la que se iguala la parte temporal es importante ya que da cuenta de los autovalores del hamiltoniano considerado.

De esta manera se puede escribir toda la dependencia temporal de  $\psi$  de forma más compacta como sigue

$$T(t) = T_0 e^{-iE(t-t_0)} \quad \text{donde} \quad T_0 = T(t = t_0). \quad (2.8)$$

## 2.2. Dependencia angular

Una vez resuelta la parte temporal se procede de manera análoga para la parte angular. A partir de ahora se va a trabajar directamente con la ecuación (2.6) pero independiente ya del tiempo de forma que a la hora de escribir la solución completa habrá que añadir el resultado obtenido en (2.8). Si se multiplican ambos miembros de la ecuación por  $-r^2$  y reordenando se llega a

$$\left( \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \right) + \left( \frac{r^2}{R(r)} \frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2r}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} + r^2 A \delta(r - r_0) + r^2 E \right) = 0. \quad (2.9)$$

Esta última ecuación tiene la ventaja de que el primer sumando sólo tiene dependencia angular mientras que el segundo sólo es radial, de manera que para que esto sea posible se deben igualar ambos términos por separado a una constante. De este modo la ecuación angular a resolver es:

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = -\lambda, \quad (2.10)$$

y la ecuación radial es:

$$\frac{r^2}{R(r)} \frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2r}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} + r^2 A \delta(r - r_0) + r^2 E = \lambda. \quad (2.11)$$

Si se multiplican ambos términos de la ecuación (2.10) por  $-\sin^2\theta$  y se reagrupan términos resulta:

$$\frac{\sin^2\theta}{\Theta(\theta)} \frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta \sin\theta}{\Theta(\theta)} \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \lambda \sin^2\theta = -\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}. \quad (2.12)$$

Nuevamente las variables  $\theta$  y  $\phi$  están separadas (observando la dependencia funcional de ambos términos se ve que cada uno depende de una única variable y no de la restante, no hay términos con dependencias cruzadas) y se pueden igualar a una constante.

### 2.2.1. Dependencia con el ángulo $\phi$

Usando como constante de separación  $\gamma$  en (2.12) la ecuación a resolver para la variable  $\phi$  se reduce a una ecuación diferencial lineal, homogénea de segundo orden:

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + \gamma\Phi(\phi) = 0. \quad (2.13)$$

Al resolverla se obtiene la relación de  $\psi$  con la variable  $\phi$ , que dependerá del valor que tenga la constante  $\gamma$ .

1) Si  $\gamma \neq 0$ ,  $\gamma < 0$  se tiene:

$$\Phi(\phi) = C_1 e^{\sqrt{-\gamma}\phi} + C_2 e^{-\sqrt{-\gamma}\phi}. \quad (2.14)$$

Por la simetría de rotación del problema la solución debe ser periódica para  $\phi$  y por ello  $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ . Al sustituirlo en la solución anterior resulta

$$\begin{aligned} C_1 e^{\sqrt{-\gamma}\phi} e^{\sqrt{-\gamma}2\pi} + C_2 e^{-\sqrt{-\gamma}\phi} e^{-\sqrt{-\gamma}2\pi} &= C_1 e^{\sqrt{-\gamma}\phi} + C_2 e^{-\sqrt{-\gamma}\phi}, \\ C_1 e^{\sqrt{-\gamma}\phi} (-1 + e^{\sqrt{-\gamma}2\pi}) + C_2 e^{-\sqrt{-\gamma}\phi} (-1 + e^{-\sqrt{-\gamma}2\pi}) &= 0. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Para que se cumpla la última igualdad se debe verificar:

$$(-1 + e^{\sqrt{-\gamma}2\pi}) = (-1 + e^{-\sqrt{-\gamma}2\pi}) = 0. \quad (2.16)$$

Esto implica que  $\gamma$  debe ser idénticamente nula. Lo cual es contradictorio con  $\gamma \neq 0$ ,  $\gamma < 0$ . De ahí que este tipo de solución no sea válida.

2) Si  $\gamma = 0$  se tiene:

$$\Phi(\phi) = C_1\phi + C_2. \quad (2.17)$$

Imponiendo la condición de periodicidad se llega a:

$$C_1\phi + C_2 = C_1\phi + C_12\pi + C_2. \quad (2.18)$$

Eso implica que  $C_1$  debe ser igual a 0 y la solución  $\Phi(\phi)$  sería una constante.

3) Si  $\gamma \neq 0$ ,  $\gamma > 0$  se tiene:

$$\Phi(\phi) = C_1 e^{i\sqrt{\gamma}\phi} + C_2 e^{-i\sqrt{\gamma}\phi}. \quad (2.19)$$

Al imponer la periodicidad para  $\phi$  se obtiene

$$C_1 e^{i\sqrt{\gamma}\phi} + C_2 e^{-i\sqrt{\gamma}\phi} = C_1 e^{i\sqrt{\gamma}\phi} e^{i2\pi\sqrt{\gamma}} + C_2 e^{-i\sqrt{\gamma}\phi} e^{i2\pi\sqrt{\gamma}} \quad (2.20)$$

La única forma de que se cumpla la periodicidad es que  $e^{i2\pi\sqrt{\gamma}} = 1$  o lo que es lo mismo, que  $2\pi\sqrt{\gamma} = 2\pi m$ , donde  $m \in \mathbb{Z}$ .

De esta manera, la dependencia funcional con  $\phi$  de la función de onda  $\psi$  solución de la ecuación de Schrödinger es

$$\Phi(\phi) \propto e^{im\phi} \quad \text{con} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (2.21)$$

El caso  $\gamma = m^2 = 0$ , en el que las exponenciales complejas involucradas en este tipo de soluciones se reducen a una constante, coincide con el obtenido en el segundo apartado desarrollado anteriormente por lo que, en realidad, con considerar sólo soluciones como las descritas en este apartado ya es suficiente.

### 2.2.2. Dependencia con el ángulo $\theta$

Por otro lado, para la variable angular  $\theta$  se retoma la ecuación (2.12) igualándola a la constante  $\gamma = m^2$  obtenida al resolver la dependencia con  $\phi$

$$\text{sen}^2 \theta \left( \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{\text{sen} \theta} \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \lambda \right) = m^2. \quad (2.22)$$

Para resolverla se hace el cambio de variable  $x = \cos \theta$ . Las derivadas con este cambio se transforman en

$$\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} = -\text{sen} \theta \frac{d\Theta(x)}{dx}, \quad (2.23)$$

$$\frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} = \text{sen}^2 \theta \frac{d^2 \Theta(x)}{dx^2} - \cos \theta \frac{d\Theta(x)}{dx}. \quad (2.24)$$

Si se sustituyen estas relaciones en la ecuación original (2.22) y se opera como sigue se llega a:

$$\frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{\text{sen} \theta} \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \left( \lambda - \frac{m^2}{\text{sen}^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = 0, \quad (2.25)$$

$$\text{sen}^2 \theta \frac{d^2 \Theta(x)}{dx^2} - 2 \cos \theta \frac{d\Theta(x)}{dx} + \left( \lambda - \frac{m^2}{\text{sen}^2 \theta} \right) \Theta(x) = 0. \quad (2.26)$$

La ecuación anterior presenta un abuso de la notación al denominar con el mismo nombre  $\Theta$  a la función independientemente de su dependencia funcional con las variables  $x$  ó  $\theta$ . Expresándolo en función de  $x$  únicamente se llega a la ecuación asociada de Legendre:

$$(1 - x^2) \frac{d^2 \Theta(x)}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta}{dx} + \left( \lambda - \frac{m^2}{1 - x^2} \right) \Theta(x) = 0. \quad (2.27)$$

La constante de separación  $\lambda$  está relacionada con el número cuántico  $\ell$  (autovalores del operador momento angular orbital) a través de la relación  $\lambda = \ell(\ell + 1)$ . De ahí que la dependencia funcional de  $\psi$  con la variable  $\theta$  no sea otra que las funciones asociadas de Legendre (para más detalles se puede consultar la referencia [17]):

$$\Theta(\theta) = P_\ell^m(\cos \theta), \quad \text{donde} \quad \ell \in \mathbb{N}, \quad -\ell \leq m \leq \ell. \quad (2.28)$$

Al trabajar con los resultados (2.21) y (2.28) se ve que la solución de la parte angular de la ecuación de Schrödinger para un potencial central en un sistema tridimensional, por ejemplo el electrón del átomo de hidrógeno sometido al potencial Coulombiano, viene dada por los armónicos esféricos<sup>1</sup>.

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) \propto P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (2.29)$$

## 2.3. Dependencia radial

Al tener en cuenta el valor de  $\lambda = \ell(\ell + 1)$  recién calculado en la ecuación (2.11), la ecuación radial a resolver toma la forma:

$$r^2 \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + 2r \frac{dR(r)}{dr} + r^2 (A \delta(r - r_0) + E) R(r) = \ell(\ell + 1) R(r). \quad (2.30)$$

### 2.3.1. Ecuación radial reducida

Para obtener la ecuación radial reducida (que resultará útil más adelante cuando se apliquen las condiciones de continuidad en el punto  $r_0$  para determinar de forma completa la función de onda en las distintas regiones del problema) se hace el cambio de variable  $u(r) = rR(r)$  y se aplica la regla de la cadena como sigue

$$\frac{dR(r)}{dr} = \frac{d}{dr} \left( \frac{u}{r} \right) = \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2}, \quad (2.31)$$

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} = -\frac{1}{r^2} \frac{du}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{1}{r^2} \frac{du}{dr} + \frac{2u}{r^3}. \quad (2.32)$$

Al sustituir estas dos relaciones en (2.30) y operar se obtiene:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[ E + A \delta(r - r_0) - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] u = 0. \quad (2.33)$$

---

<sup>1</sup> En el *Apéndice A* aparece una exposición más detallada de los armónicos esféricos.



La ecuación anterior permite visualizar el problema a resolver como uno en una única dimensión (en este caso radial). En consecuencia, define la dinámica de una partícula cuántica en las dos regiones en las que la singularidad de la delta divide el espacio físico. Como se ve en la Figura 2.1 la frontera entre ambas zonas es precisamente la posición  $r_0$  en la que está colocada la delta. Nótese que en realidad es la variable adimensional  $r_0$  la que está presente en las ecuaciones pero está relacionada con la posición real  $R_0$  según se vio en las expresiones (1.8).

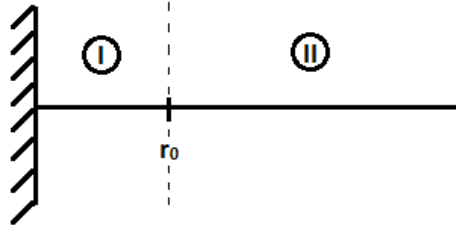


Figura 2.1: Distribución de regiones en el sistema.

### 2.3.2. Ecuación radial simplificada

El objetivo de este apartado es transformar la ecuación radial en una de Bessel a fin de poder resolverla más fácilmente. Para ello, se hace el cambio de variable  $R(r) = r^b y(r)$  en la ecuación (2.30) aplicando la regla de la cadena de la siguiente manera:

$$\frac{dR(r)}{dr} = br^{b-1}y + r^b \frac{dy}{dr}, \quad (2.34)$$

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} = b(b-1)r^{b-2}y + 2br^{b-1} \frac{dy}{dr} + r^b \frac{d^2 y}{dr^2}. \quad (2.35)$$

Al sustituir en (2.30) y operar para simplificar el resultado hay que tener en cuenta que interesan los puntos regulares en los que el término de la delta se anula (es decir, se va a trabajar con la ecuación válida en el interior de las regiones I y II de la Figura 2.1). Por este motivo, en la ecuación siguiente no aparecerá ese término singular:

$$\frac{d^2 y}{dr^2} + \left( \frac{2b+2}{r} \right) \frac{dy}{dr} + \left( E + \frac{-\ell(\ell+1) + b(b-1) + 2b}{r^2} \right) y = 0. \quad (2.36)$$

A continuación se verá que en realidad se trata de llegar a la ecuación de Bessel modificada, que tiene la forma

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy}{dx} - \left(1 + \frac{\nu^2}{x^2}\right) y = 0. \quad (2.37)$$

En efecto, se elige  $b = -1/2$  (como  $b$  es arbitraria se puede tomar ese valor) de forma que al sustituir en (2.36) resulte

$$\frac{d^2y}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dy}{dr} + \left(E - \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{r^2}\right) y = 0. \quad (2.38)$$

Finalmente, para llegar a la ecuación de Bessel se hace otro cambio de variable  $r = \mu x$  que permita transformar la ecuación anterior en:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy}{dx} + \left(E\mu^2 - \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{x^2}\right) y = 0. \quad (2.39)$$

Como se especificó al comienzo del capítulo interesan los estados ligados de este sistema ( $E < 0$ ), por lo que se puede eliminar otro grado de libertad fijando  $E\mu^2 = -1$  de manera que se llegue al resultado buscado:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy}{dx} - \left(1 + \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{x^2}\right) y = 0. \quad (2.40)$$

Si se hace  $\nu = \ell + 1/2$  se obtiene la ecuación de Bessel modificada<sup>2</sup>. En resumen, los cambios de variable que se han realizado son:

$$\mu = \frac{1}{\sqrt{-E}} > 0, \quad \nu = \ell + \frac{1}{2}, \quad R(r) = r^{-\frac{1}{2}}y(r), \quad r = \frac{1}{\sqrt{-E}}x. \quad (2.41)$$

Como se vio en la Figura 2.1 hay dos regiones de interés en las que hay que resolver la ecuación de Bessel (2.40). La solución vendrá dada por una combinación de funciones modificadas de Bessel tanto de primera especie  $I_{\ell+\frac{1}{2}}(x)$  como de segunda especie  $K_{\ell+\frac{1}{2}}(x)$  :

$$y(x) = \begin{cases} c_1 I_{\ell+\frac{1}{2}}(x) + c_2 K_{\ell+\frac{1}{2}}(x), & \text{si } x \in I \\ d_1 I_{\ell+\frac{1}{2}}(x) + d_2 K_{\ell+\frac{1}{2}}(x), & \text{si } x \in II \end{cases} \quad (2.42)$$

<sup>2</sup>En el *Apéndice B* se recogen algunas propiedades importantes de estas funciones de Bessel.

Hasta ahora se ha hallado la solución radial en las regiones *I* y *II*. Ahora se debe considerar cómo juntar esas dos soluciones teniendo en cuenta que en la posición  $r = r_0$  hay una delta de Dirac en el potencial. Para determinar la solución de forma completa hay que fijar el valor de las constantes de integración en (2.42) a partir de las condiciones físicas del problema, que se tratarán con más detalle en los siguientes apartados.

### 2.3.3. Finitud de la función de onda

Al resolver la ecuación de Schrödinger para cualquier sistema, una de las condiciones que se debe cumplir para que la solución sea físicamente aceptable es que la función de onda resultante sea finita en todo el espacio, o lo que es lo mismo, se debe verificar:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} < \infty. \quad (2.43)$$

Si se recopilan todas las soluciones de las secciones anteriores la función de onda toma la forma

$$\psi(r, \theta, \phi, t) = R(r) Y_\ell^m(\theta, \phi) e^{-iE(t-t_0)}. \quad (2.44)$$

Al sustituirla en la integral se ve que la parte temporal no contribuye por tratarse de un número complejo de módulo 1 para todo instante de tiempo en el que se mida. La parte angular tampoco genera problemas porque al tratarse de armónicos esféricos, éstos normalizan a 1 al integrar en todo su dominio (el ángulo sólido  $\Omega$ ). De esta manera resulta:

$$\int_0^\infty r^2 |R(r)|^2 dr < \infty. \quad (2.45)$$

Por tanto, sólo hace falta centrarse en que la parte radial dada por (2.42) sea normalizable en todo el espacio. Para garantizarlo hay que estudiar el comportamiento de las funciones de Bessel modificadas.

Como se ve en la Figura 2.2, las funciones de Bessel modificadas de primera especie  $I_\nu(x)$  tienen un comportamiento divergente si su argumento tiende a infinito. Por este motivo no son aceptables para la región *II*. Algo parecido ocurre con las funciones de Bessel modificadas de segunda especie  $K_\nu(x)$  cuando su argumento tiende a 0. Este comportamiento divergente hace que también se deba eliminar su contribución en la región *I*.

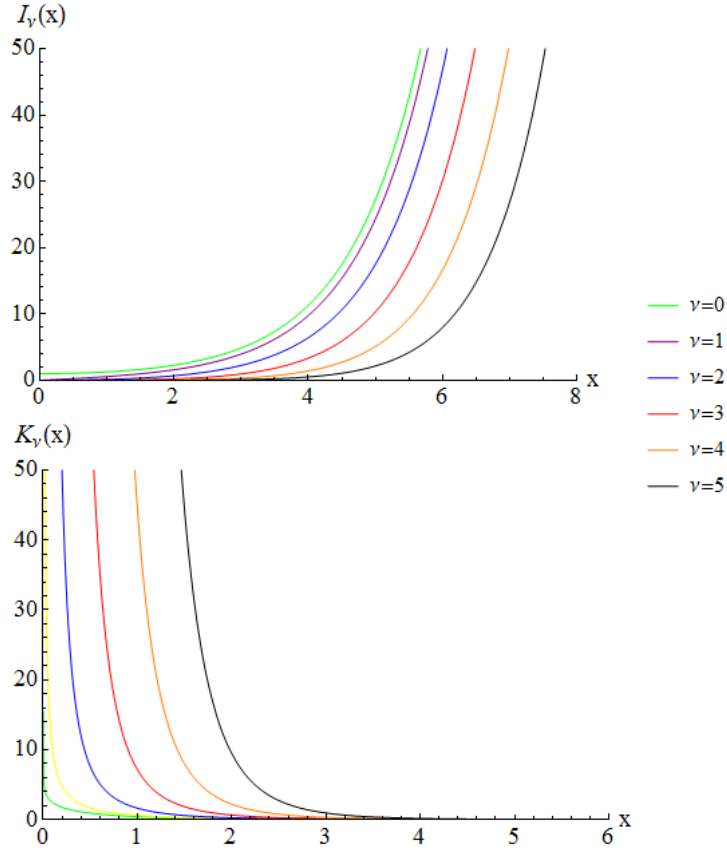


Figura 2.2: Comportamiento típico de algunas funciones de Bessel modificadas.

Ambas limitaciones se consiguen haciendo  $c_2 = 0$  y  $d_1 = 0$  en (2.42) de manera que la solución físicamente aceptable se reduzca a:

$$y(x) = \begin{cases} c_1 I_{\ell+\frac{1}{2}}(x), & \text{si } x \in I \\ d_2 K_{\ell+\frac{1}{2}}(x), & \text{si } x \in II. \end{cases} \quad (2.46)$$

Si se escribe la solución en función de  $R(r)$  usando los cambios de variables especificados en (2.41) se llega a:

$$R(r) = \begin{cases} C_1 (r\sqrt{-E})^{-\frac{1}{2}} I_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{-E}), & \text{si } 0 \leq r \leq r_0 \\ D_2 (r\sqrt{-E})^{-\frac{1}{2}} K_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{-E}), & \text{si } r \geq r_0. \end{cases} \quad (2.47)$$

Para poder obtener las dos constantes  $C_1, D_2$  (en principio arbitrarias) de esta solución es necesario imponer otras condiciones que se especifican a continuación.

### 2.3.4. Continuidad de la función de onda en $r_0$

Desde un punto de vista matemático la ecuación (2.30) puede tener muchas soluciones pero las únicas físicamente aceptables son aquellas que involucren energías  $E$  tales que la función de onda sea de cuadrado integrable con la norma  $L^2(\mathbb{R})$ . En general las funciones de onda son complejas, se comportan de forma continua en todo el dominio en el que están definidas y toman un único valor en cada punto del espacio. Pero puede haber casos en los que haya un conjunto de medida nula en su dominio donde no se verifiquen las condiciones de suavidad. Es necesario estudiar estos criterios para encontrar un conjunto completo de soluciones del problema considerado.

Téngase en cuenta el operador de posición  $X$  que es autoadjunto sobre un dominio denso del espacio de Hilbert  $H = L^2(\mathbb{R}^n)$ . En base al teorema de descomposición espectral se puede construir una base vectorial de índice continuo y la función de onda del sistema será las componentes del vector de estado respecto a esa base dada. Exigir que la función de onda sea de cuadrado integrable es necesario porque debe dar lugar a una probabilidad total de presencia finita. Debe asignar sin ambigüedad una única y físicamente razonable densidad de probabilidad de presencia de las partículas del sistema<sup>3</sup> en cada punto del espacio.

Como la ecuación diferencial a resolver es  $-\nabla^2\psi - A\delta(r - r_0)\psi = E\psi$  la función de onda debe compensar el término singular dado por la delta de Dirac. Si  $\psi$  tuviera discontinuidades de tipo delta la derivada segunda sería una  $\delta''$  que, al aparecer solo en ese término, no se puede compensar con ninguno otro. Si  $\psi$  tuviera discontinuidad de salto finito la segunda derivada sería una delta prima que al no aparecer en ningún otro miembro de la ecuación no se podría compensar tampoco. Y si la función de onda es continua, aunque no sea derivable en algún punto, la derivada segunda sería una delta que sí compensa el segundo término de la ecuación diferencial. Por tanto, hay que imponer la continuidad de la función de onda necesariamente. Si se observa la solución encontrada hasta ahora hay que garantizar que en  $r_0$  se verifique la condición de continuidad usual:

$$C_1 I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_0) = D_2 K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_0). \quad (2.48)$$

---

<sup>3</sup>Matemáticamente, se debe a Max Born (Premio Nobel en 1954) la identificación del cuadrado del módulo de la función de onda como la amplitud de la probabilidad de presencia de materia.

### 2.3.5. Discontinuidad de la derivada primera en $r_0$

Como hay dos constantes a determinar se necesitan dos ecuaciones que las ligen para formar un sistema de ecuaciones con solución no trivial. Ya se ha obtenido una ecuación en el apartado anterior. La segunda ecuación puede obtenerse teniendo en cuenta que al trabajar con potenciales que involucran deltas de Dirac, hay que aplicar la condición de discontinuidad en la primera derivada en el punto  $r = r_0$ . Se va a trabajar por simplificar los cálculos con la ecuación radial (2.33). Se integra en un entorno del punto de interés  $r_0$  y se llega a

$$\int_{r_0-\epsilon}^{r_0+\epsilon} \frac{d^2u(r)}{dr^2} dr + \int_{r_0-\epsilon}^{r_0+\epsilon} \left[ E - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u(r) dr + \int_{r_0-\epsilon}^{r_0+\epsilon} A \delta(r-r_0) u(r) dr = 0. \quad (2.49)$$

El primer término de esta relación integra a las derivadas primeras por lo que el resultado sería

$$\int_{r_0-\epsilon}^{r_0+\epsilon} dr \frac{d^2u(r)}{dr^2} = \frac{du}{dr}(r_0+\epsilon) - \frac{du}{dr}(r_0-\epsilon). \quad (2.50)$$

Si se evalúa en un entorno pequeño hay que calcular el límite en el que  $\epsilon$  tiende a cero:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{du}{dr}(r_0+\epsilon) - \frac{du}{dr}(r_0-\epsilon) \right] = \frac{du}{dr}(r_0^+) - \frac{du}{dr}(r_0^-). \quad (2.51)$$

El segundo término de (2.49) se anula al integrar en el entorno porque  $u(r)$  es una función continua en  $r_0$  de manera que su integral toma el mismo valor cuando se evalúa entre  $r_0 - \epsilon$  y  $r_0 + \epsilon$  y se considera el límite  $\epsilon \rightarrow 0$ . El tercer término de (2.49) es la integral de una delta en el entorno considerado. El resultado de la integración será la función que acompaña a la delta evaluada en el punto  $r_0$ :

$$\int_{r_0-\epsilon}^{r_0+\epsilon} dr A \delta(r-r_0) u(r) = A u(r_0). \quad (2.52)$$

Este resultado es independiente del valor de  $\epsilon$ . Si se agrupan todos estos resultados se llega a la ecuación buscada para la discontinuidad de la derivada en  $r_0$

$$\frac{du}{dr}(r_0^+) - \frac{du}{dr}(r_0^-) + A u(r_0) = 0. \quad (2.53)$$

Teniendo en cuenta este resultado, así como el cambio de variable realizado  $u(r) = r R(r)$  y la solución hallada para  $R(r)$  en (2.47), se llega a que la condición (2.53) adopta la forma:

$$\begin{aligned} & \left[ -\sqrt{-E} (1 + \ell - Ar_0) I_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{-E}) + E r_0 I_{\ell+\frac{3}{2}}(r_0\sqrt{-E}) \right] C_1 \\ & + \left[ \sqrt{-E} (1 + \ell) K_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{-E}) + E r_0 K_{\ell+\frac{3}{2}}(r_0\sqrt{-E}) \right] D_2 = 0. \end{aligned} \quad (2.54)$$

En la sección siguiente se van a analizar las consecuencias de los resultados que se acaban de obtener.

## 2.4. Interpretación física

El desarrollo realizado en la sección anterior da lugar a las dos ecuaciones (2.48) y (2.54) necesarias para terminar de determinar la solución (2.47) y que se recogen a continuación:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_1 I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_0) = D_2 K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_0) \\ \left[ -\sqrt{-E} (1 + \ell - Ar_0) I_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{-E}) + E r_0 I_{\ell+\frac{3}{2}}(r_0\sqrt{-E}) \right] C_1 \\ + \left[ \sqrt{-E} (1 + \ell) K_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{-E}) + E r_0 K_{\ell+\frac{3}{2}}(r_0\sqrt{-E}) \right] D_2 = 0. \end{array} \right. \quad (2.55)$$

Este sistema de ecuaciones lineal y homogéneo va a permitir despejar las constantes no nulas  $C_1$  y  $D_2$  que determinan de manera unívoca la solución de la parte radial. Por el teorema de Rouché-Frobenius, ese sistema da una solución distinta de la trivial cuando el determinante de la matriz de coeficientes es cero. Al resolver el determinante se obtiene una ecuación trascendente relativamente sencilla para la energía

$$Ar_0 I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_0) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_0) = 1. \quad (2.56)$$

Si, por comodidad, se define  $\sigma = r_0\sqrt{-E}$  se pueden agrupar las constantes de manera que la relación anterior se simplifique a

$$I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) = \frac{1}{Ar_0}. \quad (2.57)$$

La variable  $\sigma$  que se representa en la ecuación anterior es fundamental porque relaciona los estados ligados solución de la ecuación trascendente con la energía de los mismos.

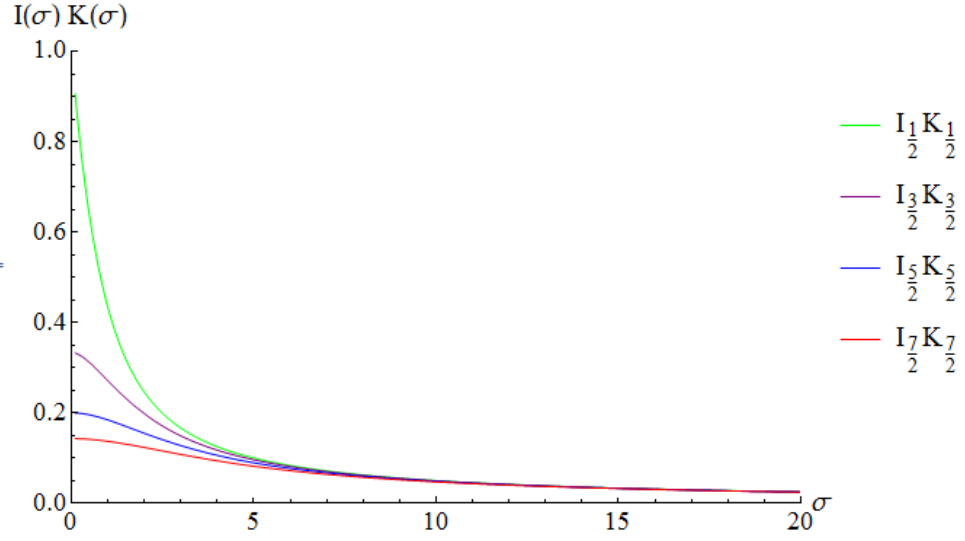


Figura 2.3: Comportamiento de  $I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)$  para  $\ell = 0, 1, 2, 3$ .

Si se observa la Figura 2.3 se ve que el producto de las funciones de Bessel modificadas tiene un comportamiento similar en todos los casos. Cuando la variable  $\sigma$  tiende a infinito el producto tiende a cero y cuando  $\sigma$  tiende a cero el producto siempre corta al eje de ordenadas. Si se elige de forma correcta el valor de la constante  $1/(r_0 A)$  habrá estados ligados. Es decir, cuando el valor de la constante definida por el miembro derecho de (2.57) sea menor o igual que el valor del límite cuando  $\sigma \rightarrow 0$  entonces para ese valor de  $\ell$  habrá un único punto de corte entre ambas funciones y existirán estados ligados.

Se puede calcular el límite utilizando los comportamientos de cada una de las funciones de Bessel y operando como sigue:

$$\begin{aligned}
 \lim_{\sigma \rightarrow 0} I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) &\approx \left(\frac{\sigma}{2}\right)^{\ell+\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(\ell+\frac{1}{2}+1)}, & \text{con } \ell \neq -1, -2, -3, \dots, \\
 \lim_{\sigma \rightarrow 0} K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) &\approx \frac{\Gamma(\ell+\frac{1}{2})}{2} \left(\frac{\sigma}{2}\right)^{-(\ell+\frac{1}{2})}, & \text{con } \ell > 0, \\
 \lim_{\sigma \rightarrow 0} I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) &\approx \frac{1}{2} \frac{\Gamma(\ell+\frac{1}{2})}{\Gamma(\ell+\frac{3}{2})} = \frac{1}{2\ell+1}, & (2.58)
 \end{aligned}$$

donde se ha usado la propiedad de las funciones gamma  $\Gamma(\ell+1) = \ell\Gamma(\ell)$ .

Además, a partir de la Figura 2.3 se ve que el comportamiento de la función hallada  $I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)$  es decreciente en todo su dominio.



Se puede demostrar que el límite cuando la variable  $\sigma$  tiende a infinito es cero si se usan las propiedades asintóticas de las funciones de Bessel modificadas:

$$\lim_{\sigma \rightarrow \infty} I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) \approx \frac{e^\sigma}{\sqrt{2\pi\sigma}}, \quad (2.59)$$

$$\lim_{\sigma \rightarrow \infty} K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2\sigma}} e^{-\sigma}, \quad (2.60)$$

$$\lim_{\sigma \rightarrow \infty} I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) \approx \lim_{\sigma \rightarrow \infty} \frac{1}{2\sigma} = 0. \quad (2.61)$$

Este comportamiento unido al descrito anteriormente cuando la energía (a través de la variable  $\sigma$ ) tiende a cero, permite establecer un criterio para la existencia o no de estados ligados para un momento angular dado. Si se retoma la ecuación (2.57) se ve que su solución gráfica será el punto de corte entre la expresión producto de funciones de Bessel descrita y estudiada hasta ahora y la función constante definida por  $1/(Ar_0)$ . Para que dicho corte exista para un momento angular  $\ell$  dado lo único que importa es el valor del límite de la parte izquierda de la ecuación trascendente (ecuación (2.57)), que seguirá la expresión dada en (2.58).

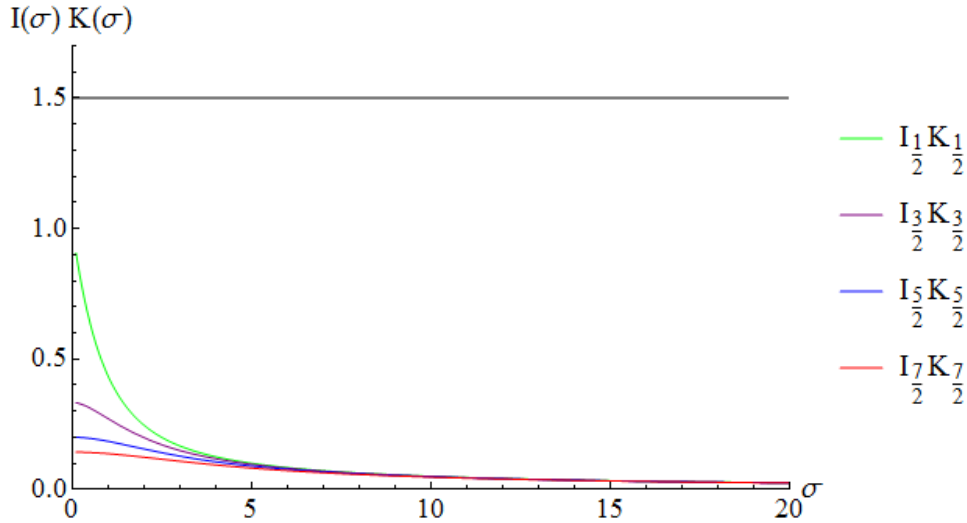


Figura 2.4: Configuración  $1/(Ar_0) = 1,5$  (recta negra). No existen estados ligados para  $\ell = 0, 1, 2, 3$ .

En el caso en el que dado un  $\ell$  la constante definida por  $1/(Ar_0)$  sea mayor que  $1/(2\ell + 1)$  no se producen cortes entre las dos funciones y no hay estados ligados, como se aprecia en la Figura 2.4.

Por el contrario, si dado un  $\ell$  la constante  $1/(Ar_0)$  es menor o igual que  $1/(2\ell+1)$  hay intersecciones entre las dos funciones y aparecen estados ligados en el sistema, como se ve en la Figura 2.5.

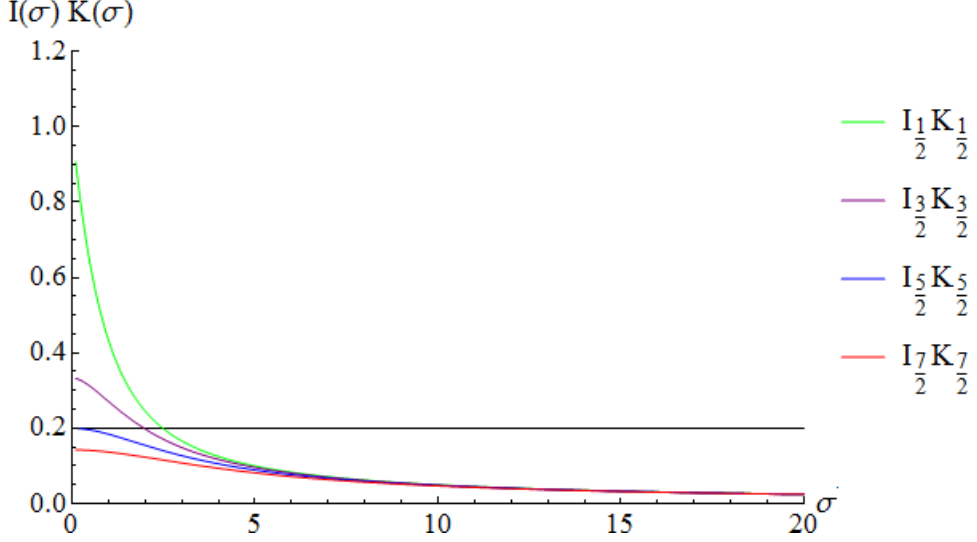


Figura 2.5: Configuración  $1/(Ar_0) = 0,2$  (recta negra). Existen estados ligados para  $\ell = 0, 1, 2$  pero no para  $\ell = 3$ .

Si se desea conocer el máximo valor de  $\ell$  para el cual hay estados ligados dada una configuración de la delta (tanto la amplitud  $A$  como la posición  $r_0$  estarán fijadas) se puede despejar el cociente entre las constantes  $D_2/C_1$  en el sistema formado por las condiciones de continuidad y discontinuidad en el punto  $r_0$  (2.55). Además se deben igualar las dos expresiones de ese cociente procedente de cada una de las condiciones anteriores porque la solución debe ser la misma. Tras igualarlas y llamando  $\sigma = r_0\sqrt{-E}$  se obtiene:

$$\frac{I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)}{K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)} = \frac{(r_0A - \frac{1}{2})I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) + \sigma I'_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)}{\sigma K'_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma) - \frac{1}{2}K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)}. \quad (2.62)$$

Operando se llega a la siguiente expresión:

$$-\frac{1}{2} + \sigma \frac{K'_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)}{K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)} = \left(r_0A - \frac{1}{2}\right) + \sigma \frac{I'_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)}{I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)}. \quad (2.63)$$

Introduciendo la derivada logarítmica de las funciones de Bessel en la forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \log I_\nu(z) &= -\frac{\nu}{z} + \frac{I_{\nu-1}(z)}{I_\nu(z)}, \\ \frac{d}{dz} \log K_\nu(z) &= -\frac{\nu}{z} + \frac{K_{\nu-1}(z)}{K_\nu(z)}, \end{aligned} \quad (2.64)$$

se llega al resultado buscado:

$$F_\ell(\sigma) = \sigma \left[ \frac{K_{\ell-\frac{1}{2}}(\sigma)}{K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)} + \frac{I_{\ell-\frac{1}{2}}(\sigma)}{I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sigma)} \right] = r_0 A. \quad (2.65)$$

De esta manera, en el miembro izquierdo de la ecuación anterior se ha encontrado una función  $F_\ell(\sigma)$  que sólo depende del número cuántico  $\ell$  y que está evaluada en  $\sigma = r_0 \sqrt{-E}$ . El miembro derecho de la ecuación sólo depende de las características de la delta y dada una configuración concreta será una constante.

En la Figura 2.6 se muestra que el comportamiento de estas funciones  $F_\ell(\sigma)$  es creciente en todo el dominio. Por ello se llega a la conclusión de que, dado un  $\ell$ , las condiciones que determinan la presencia o no de estados ligados son las que siguen:

$$\begin{aligned} \text{Si } \lim_{\sigma \rightarrow 0} F_\ell(\sigma) &\leq r_0 A, & \text{hay un estado ligado.} \\ \text{Si } \lim_{\sigma \rightarrow 0} F_\ell(\sigma) &> r_0 A, & \text{no hay estados ligados.} \end{aligned}$$

Si se evalúa el límite indicado se llega a:

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} F_\ell(\sigma) = \frac{2\Gamma(\frac{3}{2} + \ell)}{\Gamma(\frac{1}{2} + \ell)} = 2\ell + 1. \quad (2.66)$$

Del resultado anterior (2.66) aplicado a la expresión (2.65) se deduce que si el sistema tiene estados ligados el mayor valor de  $\ell$  en el que se producen estos estados para un  $A$  y  $r_0$  dados es:

$$\ell_{max} = \left\lfloor \frac{r_0 A - 1}{2} \right\rfloor, \quad (2.67)$$

donde  $\lfloor \cdot \rfloor$  denota la función suelo o parte entera del argumento que devuelve el máximo número entero y no superior al mismo.

Sin embargo hay un detalle que es preciso tener en cuenta. Al hablar del número cuántico  $\ell$  no vale cualquier posible valor ya que se ha definido por construcción que  $\ell \in \mathbb{N}$ . En general el argumento de (2.67) será un número fraccionario. De ahí que sea necesario tomar solo la parte entera del mismo. Por tanto, los valores que toma la  $\ell$  en el sistema se pueden calcular si se conocen las características de la delta independientemente del valor de la energía, que es en el última instancia la variable relacionada con  $\sigma$ .

Si se desea conocer el número total de estados ligados en el sistema para una energía dada se puede definir una función:

$$N(r_0, A) = \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} (2\ell + 1) = (1 + \ell_{max})^2 = \left\lfloor \frac{r_0 A + 1}{2} \right\rfloor^2. \quad (2.68)$$

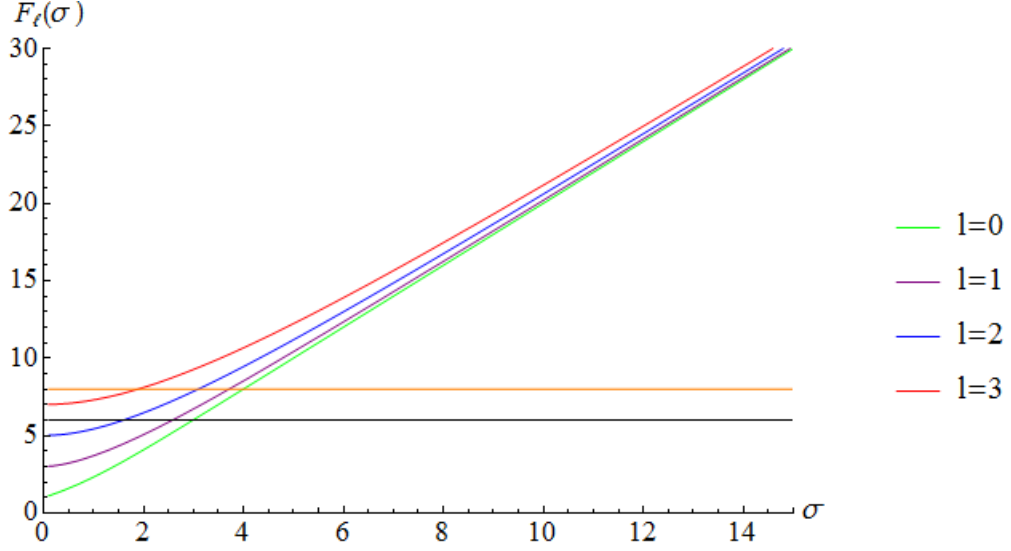


Figura 2.6: Comportamiento de  $F_\ell(\sigma)$  para  $\ell = 0, 1, 2, 3$ . La recta naranja (que corresponde a  $r_0A = 8$ ) liga un estado para  $\ell = 3$  mientras que la recta negra (correspondiente a  $r_0A = 6$ ) no lo hace.

Finalmente, hay que tener en cuenta un par de cuestiones. Así descrito el comportamiento del sistema queda determinado por las constantes  $E, r_0, A$ . Es decir, el valor de la energía, el punto en el que se centre la delta y el acoplamiento de la misma (nótese que las variables adimensionales enumeradas se relacionan a través de la longitud de onda Compton con estas magnitudes). Variar estos parámetros inducirá cambios en los estados ligados del sistema aunque no todos los parámetros produzcan las mismas variaciones. A continuación se analizan estos cambios.

#### a) Constante de acoplamiento $A$ de la singularidad.

Si se observa la ecuación trascendente para la energía de los estados ligados (expresión dada en (2.57)), el acoplamiento  $A$  sólo aparece explícitamente en el término derecho formando parte de una constante. Al resultar el miembro izquierdo invariante, la modificación de este parámetro no afecta de ninguna manera a la representación del producto de funciones de Bessel. Cuando disminuye la constante de interacción de la delta (nótese que por definición  $A > 0$ ), el valor de  $1/A$  aumenta, alejándose de la representación del producto de las funciones de Bessel modificadas. Esto producirá una situación como la descrita en la Figura 2.4 y dejará de haber estados ligados para el mismo  $\ell$  que antes de disminuir  $A$  sí los tenía.

**b) Posición  $r_0$  en la que se centra la singularidad.**

Esta característica tiene un comportamiento distinto al del acoplamiento porque además de multiplicar todo el término izquierdo aparece dentro del argumento de las funciones de Bessel de manera que sí variará su representación. Se puede expresar la ecuación trascendente (2.57) como:

$$r_0 I_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{-E}) K_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{-E}) = \frac{1}{A}. \quad (2.69)$$

Como el miembro derecho sigue siendo la misma constante  $A$  (la constante de acoplamiento de la delta), las energías que anteriormente ligaban estados para un  $r_0$  dado, puede que no lo hagan para un  $r_1$  distinto (Figura 2.7).

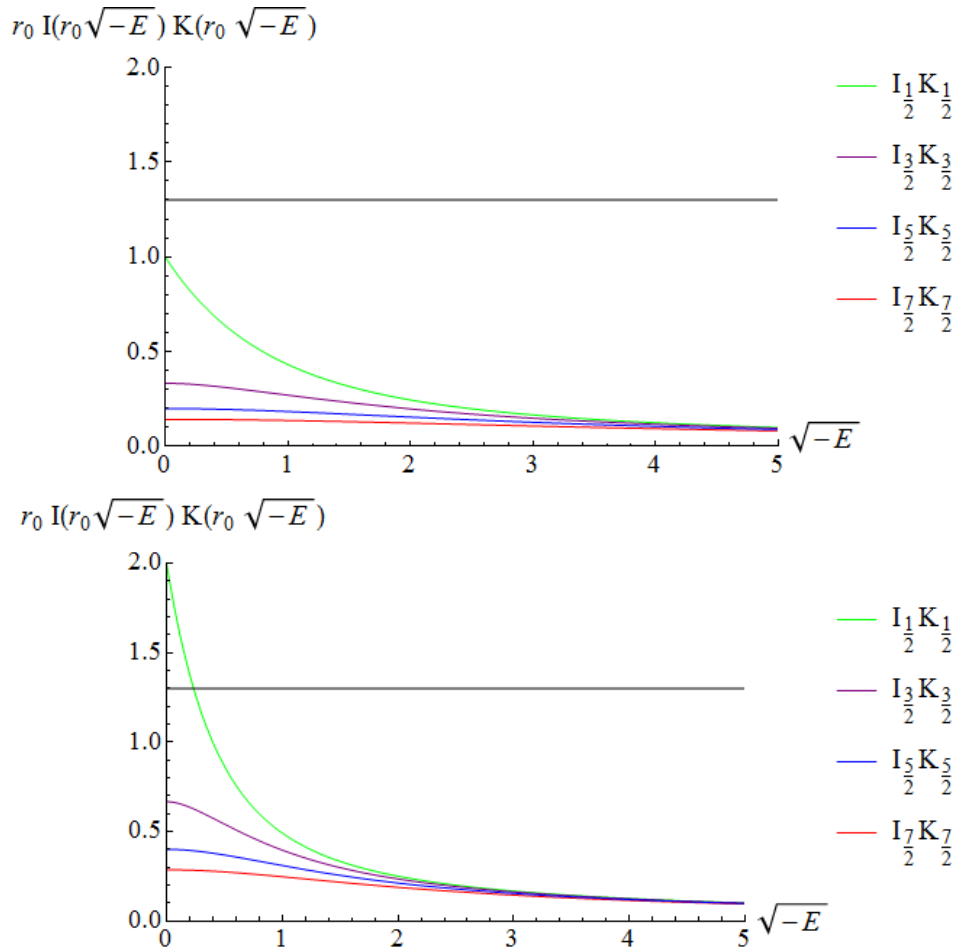


Figura 2.7: Comportamiento del término de la izquierda en la ecuación (2.69) cuando  $r_0 = 2$  (abajo) y cuando  $r_0 = 1$  (arriba). La recta negra representa una configuración del sistema en la que  $1/A = 1,3$ .

Es decir, si se observa el límite cuando  $\sqrt{-E}$  tiende a cero se puede establecer un criterio para ver si esta nueva configuración del sistema liga estados o no. Seguirá habiendo estados ligados a pesar de aumentar el valor de  $r_0$  si en la nueva configuración se verifica:

$$\frac{r_0}{2\ell + 1} > \frac{1}{A}. \quad (2.70)$$

Cuando aumenta el valor de  $r_0$  disminuye el valor de la energía del estado ligado para un mismo  $\ell$  (nótese que la energía es negativa). Por dar una idea de la variación que se produce, en este ejemplo concreto (Figura 2.8), para una  $A = (1/0,9) \approx 1,11$  si  $r_0 = 1$  se resuelve numéricamente la ecuación y se obtiene que la energía del estado ligado a través de su variable adimensional es  $E = -0,011$  mientras que duplicar el valor de  $r_0$  lleva a una energía tal que  $E = -0,226$  (recuérdese que se está trabajando con variables adimensionales. Si se quisiera obtener el valor real de la energía en unidades de  $eV$  habría que multiplicarlo convenientemente por la longitud de onda Compton como se indicó en su momento en el *Capítulo 1*).

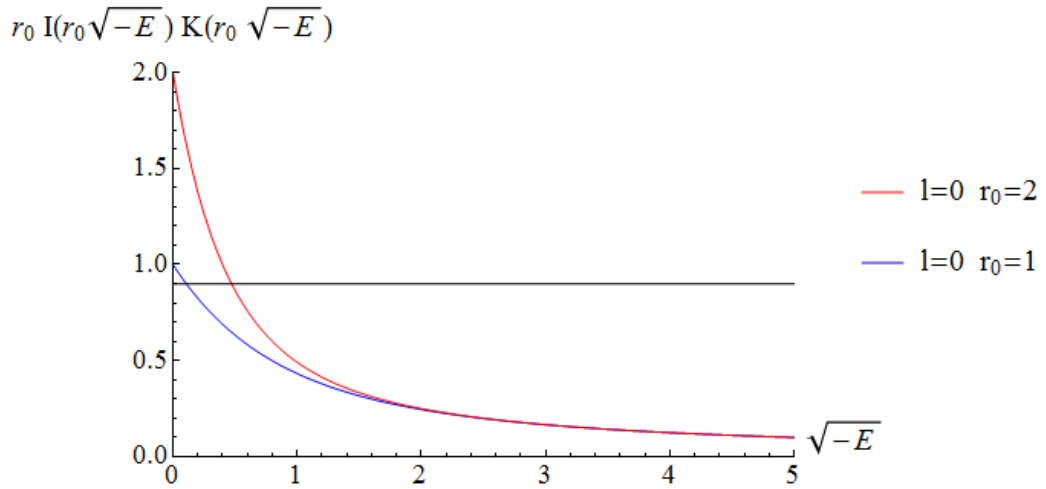


Figura 2.8: Energía del estado ligado cuando  $r_0 = 1$  (color azul) y  $r_0 = 2$  (color rojo). La recta negra representa una configuración del sistema en la que  $1/A = 0,9$ .

## 2.5. Agujeros negros y aislantes topológicos

Para cerrar este capítulo es conveniente aportar unas breves conclusiones sobre la aplicación de este cálculo de estados ligados en modelos más

complejos que involucran agujeros negros, radiación de Hawking o aislantes topológicos.

Los estados ligados en las geometrías de los agujeros negros vienen del estudio de las extensiones autoadjuntas del laplaciano cerca del horizonte y se pueden entender como microestados de borde de partículas cuánticas cercanas al agujero. En el horizonte, la geometría de los agujeros se puede representar con potenciales singulares estudiados en el marco de mecánica cuántica en presencia de condiciones de contorno (los agujeros negros se pueden modelizar mediante potenciales combinación de deltas y deltas primas<sup>4</sup>).

En QFT estos estados ligados están relacionados con el concepto de entropía [18]. Bekenstein conjeturó que si todo lo que entra en un agujero no puede salir se podría reducir la entropía del universo lanzando objetos a su interior, lo que violaría las leyes de la termodinámica. Supuso que el área del agujero negro daba una idea de su entropía. Al lanzar materia al agujero aumenta su masa y su radio y, por ende, su entropía, compensando la disminución de entropía del universo al lanzar el objeto al agujero. Propuso una expresión que es la entropía de Planck multiplicada por el área del horizonte de sucesos involucrando constantes fundamentales como la velocidad de la luz ( $c$ ), la constante de Boltzmann ( $k$ ), la constante de gravitación universal ( $G$ ) y la constante de Planck ( $\hbar$ ). Con la ayuda de la hipótesis de la radiación de Hawking se llegó al siguiente valor de la entropía para un agujero negro esférico de radio  $R$ :

$$S = \frac{k4\pi R^2}{4\ell_p^2} \quad \text{con} \quad \ell_p = \sqrt{\frac{G\hbar}{c^3}} \quad (2.71)$$

donde  $\ell_p$  es la longitud de Planck. Esta ley informa sobre los estados microscópicos que viven cerca del horizonte y cómo su número crece rápido con el área. Se suele definir la entropía como un enredo de estados cerca del horizonte que no son accesibles para un observador asintótico situado fuera del mismo (más información en [19, 20]).

El estudio de las condiciones de contorno<sup>5</sup> que son física y matemáticamente relevantes para hacer que el hamiltoniano sea un operador autoadjunto en dominios extensos apropiados del espacio de Hilbert de las funciones  $L^2(\mathbb{R}^3)$  introduce características nuevas que pueden observarse en el efecto Casimir, aislantes topológicos, gravedad cuántica y agujeros negros... Se pueden estudiar condiciones de contorno como la de Dirichlet, Neumann o Robin.

<sup>4</sup>Para más información ver [12].

<sup>5</sup>Estas ligaduras se obtienen a través de potenciales singulares o puntos de interacción local en el espacio tiempo. Por ejemplo, el potencial  $\delta$  introduce discontinuidad en la derivada primera de la función de onda y el  $\delta'$  la introduce en la propia función de onda.

A pesar de las singularidades, el Hamiltoniano permanece autoadjunto y la QFT describe bien la evolución unitaria. Se resuelve el problema como se ha hecho en este capítulo reduciéndolo a una dimensión radial con un potencial central para estudiar estados ligados y de scattering en función del signo de la energía. Además, introducir distribuciones singulares de los potenciales ayuda a estudiar condiciones de contorno dependientes del tiempo y enlazar con la radiación de un agujero negro.

Si se modeliza el agujero como un disco de radio  $R$ , se considera un hamiltoniano con un potencial singular combinación de  $\delta$  y  $\delta'$  alrededor de un círculo y se estudian los estados ligados como se ha hecho en este capítulo, se ve que su número es proporcional al radio del círculo (salvo constantes de normalización que involucran las constantes que modulan ambas deltas). Si solo hay un potencial delta simple se obtiene un máximo en el número de estados ligados que es el entero más próximo por debajo a las constantes que definen la singularidad de la delta, como en el caso estudiado en este capítulo. Los estados ligados además están localizados cerca de la condición de contorno y se desvían cuando aumenta el acoplamiento de la derivada de la delta. Están localizados fuera del contorno para valores positivos del acoplamiento de la  $\delta'$ , que se puede modular para reducir la probabilidad de encontrar la partícula dentro del modelo de agujero negro. Los momentos angulares altos se mueven cerca de la condición de ligadura para esa constante de interacción negativa de la delta prima. En tres dimensiones el número de estados hasta el número cuántico  $\ell_{max}$  es proporcional a  $2\ell_{max}^2$  por lo que el número de estados ligados será proporcional al área  $R^2$  del agujero negro. Aunque estos resultados valen para el espacio euclidiano también se puede generalizar al potenciales de fondo curvos porque las interacciones puntuales son locales. Al añadir un potencial  $\delta'$  lo que se hace es extender el soporte de estados ligados a longitudes ampliadas para permitir efectos cuánticos más allá de la longitud de Planck.

El modelo *brick wall* de 't Hooft considera campos escalares que se desvanecen a pequeñas distancias del horizonte  $\phi(R+h) = 0$  (son las condiciones de Robin para  $h$  pequeño) pero en el potencial combinación de dos deltas se pueden mantener los efectos cuánticos más allá de esa distancia pequeña. Si se controla el acoplamiento de la  $\delta'$  se puede controlar el efecto túnel a través de la condición de contorno. Y si se lleva el radio a infinito manteniendo fijo el número de estados ligados, estos empiezan a tener energía cero y a localizarse en la condición de contorno.

Con el estudio de estados ligados se puede calcular el valor esperado de la función radial del  $n$ -ésimo estado ligado normalizado por el radio del agujero. Los estados cerca del borde se desvían hacia dentro o fuera cuando aumenta el acoplamiento de la delta prima como se ve en la Figura 2.9.



Se sitúan fuera del borde cuando la constante de interacción de la delta prima es positiva así que se puede escoger su valor para reducir la probabilidad de encontrar estados ligados dentro del agujero.

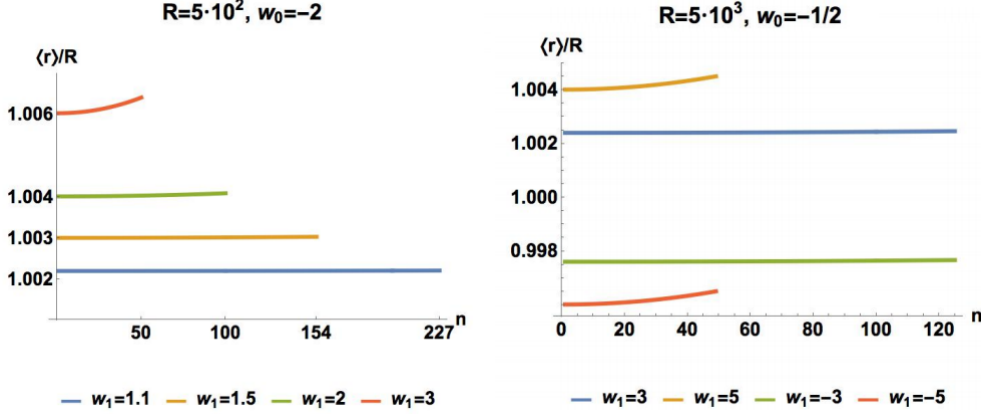


Figura 2.9:  $\langle r_n \rangle / R$  en función del número de estados ligados para una configuración  $R = 5 \cdot 10^2, w_0 = -2$  (intensidad de  $\delta$ ) y valores positivos de  $w_1$  (intensidad de la  $\delta'$ ) en la parte izquierda y una configuración  $R = 5 \cdot 10^3, w_0 = -1/2$  (intensidad de  $\delta$ ) y valores positivos de  $w_1$  (intensidad de la  $\delta'$ ) en la parte derecha de la imagen. Fuente: [12]

Si además los potenciales singulares dependen del tiempo se puede explicar la radiación de Hawking (emisión o absorción de partículas por el agujero). Es una contribución de dos fenómenos: el efecto túnel de las partículas en el borde del agujero y el hecho de que un observador lejano fuera del agujero ve caer las partículas al mismo de manera que para él se quedan pegados a una distancia del borde (modelo *brick wall* 't Hooft<sup>6</sup>) y el desplazamiento hacia el rojo, o dicho de otro modo, las frecuencias con las que las ve se corresponden con las energías de los estados ligados de esos pozos en el borde del agujero. Los estados ligados quedan a una distancia del horizonte de la longitud de onda Compton.

Otra aplicación a los cálculos realizados es el estudio de nuevos materiales de interés como son las estructuras topológicas. Un aislante topológico<sup>7</sup> es un material que se comporta como un aislante en su interior pero cuya superficie contiene estados conductores debido a las propiedades topológicas de la función de onda cuántica de los electrones.

<sup>6</sup>Para más información ver [21].

<sup>7</sup>Se pueden ver varios ejemplos y discusiones de propiedades en las referencias [22, 23, 24, 25].

En otras palabras, estos estados vienen dados por simetrías de la topología del borde y cualquier perturbación magnética o de otro tipo que no la modifique no afecta a esos estados. Los aislantes ordinarios también pueden tener este tipo de estados en el *gap* pero no presentan simetría protegida por inversión temporal. En tres dimensiones espaciales se pueden conseguir con compuestos como antimonio de bismuto o hexaboruro de samario. La simetría de inversión temporal protegiendo estados de borde ocurre en pozos cuánticos.

El material aislante y el aire en el que se encuentra el material tienen distintos invariantes topológicos que cambian cuando se cruza la frontera, por lo que la superficie se vuelve metálica. Los estados de borde de un superconductor topológico así como los estados de borde formados en la frontera de un aislante topológico y un superconductor son los estados ligados del pozo cuántico determinado por potenciales singulares.

En teoría cuántica de campos no masivos cuando se tiene una variedad compacta con condiciones de borde (caso aplicable al efecto Casimir o los aislantes topológicos) el operador laplaciano ya no cumple que sea autoadjunto y positivo, como cuando se tiene campos no masivos en una variedad. Tendrá autovalores negativos [26] (independientemente de la función de onda sobre la que actúe) cuyos estados propios asociados son los estados superficiales que están localizados cerca del borde de la variedad. Si por ejemplo se imponen condiciones de Robin sobre el borde se ve que, si se deriva a las condiciones de Dirichlet, los estados están progresivamente más cerca del borde y los autovalores toman valores de energías negativas cuyo módulo se hace cada vez más grande [27]. El cristal del interior presenta un gran *gap* entre el estado de energía cero y el mínimo de la banda de energía permitida. Estos estados ligados superficiales tienen energías dentro de ese *gap*. Este comportamiento no depende de la topología o de la geometría riemanniana de la variedad (se puede extender a espacios curvos usando derivadas covariantes).

En el caso de tres dimensiones la variedad considerada es una bola  $B^3$  y el borde es  $S^2$  y para esta geometría se conserva paridad e inversión temporal. Para el hamiltoniano de Dirac con un término masivo también se pueden encontrar estados ligados pero no se conserva ni la paridad ni la simetría de inversión temporal.

# Capítulo 3

## Scattering no relativista

En este capítulo se calcularán los estados no ligados o estados de scattering de la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones para el caso en el que haya una única singularidad con simetría radial centrada en el origen. El potencial a estudiar será, por tanto,

$$V(r) = -A \delta(r - r_0), \quad \text{donde} \quad A > 0.$$

Hay que tener en cuenta que tanto si se elige este potencial como si se cambia el signo y se estudia una barrera en lugar de un pozo, siempre va a haber estados de scattering correspondientes al espectro de energías positivas en el sistema. La primera parte del capítulo presenta la teoría necesaria para realizar los cálculos del desfase en el método de ondas parciales. Posteriormente se realizarán los cálculos para el potencial original presentado en el capítulo anterior. Finalmente se comentará las diferencias con la barrera de potencial correspondiente al potencial

$$V(r) = A \delta(r - r_0), \quad \text{donde} \quad A > 0.$$

### 3.1. Scattering elástico

En esta sección se va a presentar la teoría que permite estudiar las colisiones elásticas (la partícula dispersada no gana ni pierde energía) de partículas elementales contra un blanco. Se supone que el efecto de la interacción puede ser representado mediante un potencial real local  $V(r)$  (esto no es válido en general en la teoría cuántica de campos para partículas elementales).

Al hacer medidas de observables en el proceso de scattering sólo importan los estados asintóticos de las partículas dispersadas por lo que no es necesario conocer el estado del sistema entero cuando las partículas están muy cerca y están interaccionando (conexión con la QFT). El procedimiento que se va a seguir es el método de las ondas parciales.

Se considera un haz de partículas monoenergéticas que colisionan contra un blanco. La intensidad del haz es lo suficientemente baja para que no interaccionen las partículas incidentes entre sí. No se produce scattering múltiple contra los centros del blanco. Se coloca un detector en la zona asintótica para observar la distribución angular de las partículas dispersadas.

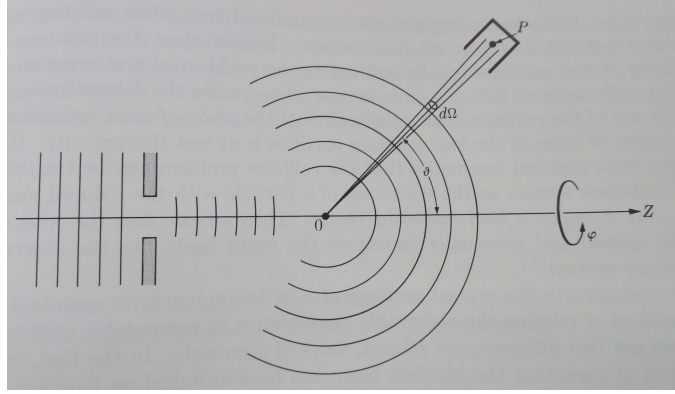


Figura 3.1: Experimento de dispersión de partículas por un blanco puntual.

La sección eficaz diferencial  $\sigma(\theta, \phi)$  es el cociente entre las partículas dispersadas captadas por el detector por unidad de ángulo sólido y el flujo de partículas incidentes. Por ello, el número  $N$  de partículas dispersadas por unidad de tiempo y unidad de ángulo sólido en la dirección  $(\theta, \phi)$  cuando el blanco está constituido por  $n$  núcleos y el haz inicial tiene intensidad  $I_0$  viene dada por:

$$N = nI_0\sigma(\theta, \phi)d\Omega. \quad (3.1)$$

El problema de colisiones entre dos partículas se puede reducir a scattering con un centro de masas del sistema fijo (para que las partículas del blanco no se muevan después de colisionar). Se va a considerar que todo el sistema es un estado estacionario. Al resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial  $V(r)$  no coulombiano siendo  $E$  la energía cinética de las partículas incidentes en la zona asintótica se obtiene que la función de onda de las partículas debe ser:

$$\psi(\vec{r}) \approx e^{ikz} + f(\theta, \phi)\frac{e^{ikr}}{r}. \quad (3.2)$$

Esta forma funcional indica que en la zona del detector la función de onda es la superposición de la onda plana incidente propagándose en la dirección  $z$  y una onda esférica dispersada con amplitud  $f(\theta, \phi)$ . Con esta definición, si se calculan los flujos como densidades de probabilidad, se llega a la conclusión de que la sección eficaz diferencial toma la forma:

$$\sigma(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2. \quad (3.3)$$

El objetivo es calcular la forma de la función de onda dispersada en la zona asintótica para determinar a partir de ahí la amplitud de scattering y la sección eficaz. Se trabajará en el espectro continuo de energías. Si se resuelve la ecuación de Schrödinger con un potencial reducido  $U(r)$  usando las funciones de Green<sup>1</sup> se llega a:

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}') d^3\vec{r}'. \quad (3.4)$$

Si se estudia este estado en la zona asintótica se ve que se reduce a :

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{i\vec{k}\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}') d^3\vec{r}'. \quad (3.5)$$

Al comparar con el comportamiento asintótico esperado se obtiene el valor de la amplitud de dispersión. Suele interesar hacer una aproximación a orden cero en la función de onda dispersada (aproximación de Born) para que al sustituirla en la ecuación anterior se obtenga que la amplitud de dispersión (y por ende la sección eficaz) es la transformada de Fourier del potencial:

$$f_k^{(B)}(\theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{K}\vec{r}'} U(\vec{r}') d^3\vec{r}', \quad \text{con} \quad \vec{K} = \vec{k}_{dispersada} - \vec{k}_{incidente}. \quad (3.6)$$

La aproximación de Born es válida para todo potencial en régimen de altas energías de las partículas incidentes en comparación con la energía de interacción. La mayoría de los proyectiles se dispersarán hacia delante con ángulos pequeños.

---

<sup>1</sup>Para más detalles ver sección 3.2 de *Advanced Quantum Theory* de P. Roman.

### 3.1.1. Método de ondas parciales

Dada la limitación en el rango de energías que supone la aproximación de Born, resulta interesante resolver la ecuación integral de la teoría de scattering con el método de ondas parciales porque es aplicable a cualquier potencial central en cualquier régimen de energías, aunque se recomienda especialmente para pequeñas energías.

En un potencial central un conjunto completo de observables compatibles es  $H, L^2, L_z$ . Se va a trabajar con los estados propios  $\phi_{k,l,m}(\vec{r})$ , también llamados ondas parciales. En la zona asintótica (para  $\vec{r}$  grandes) las ondas parciales son estados propios de la partícula libre, que se van a denominar ondas esféricas libres  $\phi_{k,l,m}^0(\vec{r})$ .

La idea del método es calcular las ondas esféricas libres y las ondas parciales en la zona asintótica. Al compararlos se ve que la diferencia entre ambos es un factor de fase  $\delta_\ell(k)$  que no depende del número cuántico  $m$  por ser el potencial central y contar el problema con simetría cilíndrica. La amplitud de scattering y la sección eficaz se pueden poner en función del desfase.

Cuando se resuelve la ecuación de Schrödinger para la partícula libre (en la zona asintótica se desprecia el término centrífugo) se obtiene una forma funcional para las ondas esféricas libres que involucra funciones de Bessel esféricas:

$$\phi_{k,l,m}^0(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_\ell(kr) Y_\ell^m(\theta, \phi). \quad (3.7)$$

Si se evalúa el límite  $r \rightarrow \infty$  se ve que las ondas esféricas libres son superposición de ondas convergentes que se acercan al origen, se distorsionan dándose la vuelta a una distancia igual al parámetro de impacto y se convierten en ondas divergentes con un desfase respecto a las incidentes de  $\ell\pi$ .

$$\phi_{k,l,m}^0(\vec{r}) \sim \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_\ell^m(\theta, \phi) \frac{e^{-ikr} e^{i\ell\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\ell\frac{\pi}{2}}}{2ikr}. \quad (3.8)$$

Si ahora se estudia la ecuación de Schrödinger para un potencial central, la parte radial de los estados cambia a una combinación lineal de funciones de Bessel  $j_\ell$  y funciones de Neumann esféricas  $n_\ell$ .

$$R_{k,\ell}(\vec{r}) = C_{k,\ell} j_\ell(kr) + D_{k,\ell} n_\ell(kr). \quad (3.9)$$

La diferencia con las ondas esféricas libres es que ahora se introduce un desfase debido a la contribución de  $n_\ell$  (en las libres no se podían considerar estas funciones porque divergen en el origen).

En la zona asintótica se puede escribir:

$$\begin{aligned} R_{k,\ell}(\vec{r}) &\sim A_{k,\ell}[j_\ell(kr) - n_\ell(kr) \operatorname{tg} \delta_\ell(k)], \\ \phi_{k,l,m}(\vec{r}) &\sim -C Y_\ell^m(\theta, \phi) \frac{e^{-ikr} e^{i\ell\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\ell\frac{\pi}{2}} e^{i2\delta_\ell}}{2ikr}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Hay que expandir los estados estacionarios en la base de estas ondas parciales encontradas. Como  $V(r)$  tiene un alcance finito  $r_0$  el desfase sólo será apreciable en aquellas ondas cuya  $\ell$  sea menor que un cierto valor máximo tal que  $\sqrt{\ell_{max}(\ell_{max} + 1)} \approx kr_0$ . En general las ondas dispersadas tendrán la forma:

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell + 1)} R_{k,\ell}(r) Y_\ell^0(\theta, \phi). \quad (3.11)$$

No se suma en  $k$  porque es un estado estacionario de energía fija y tampoco tiene dependencia con el ángulo  $\phi$  por la simetría cilíndrica del problema. Finalmente se ve que el comportamiento asintótico es el siguiente:

$$\begin{aligned} \psi_k(\vec{r}) \sim - \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell + 1)} Y_\ell^0(\theta, \phi) &\left[ \frac{e^{-ikr} e^{i\ell\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\ell\frac{\pi}{2}}}{2ikr} \right. \\ &\left. - \frac{e^{ikr}}{kr} e^{-i\ell\frac{\pi}{2}} e^{i\delta_\ell} \operatorname{sen}(\delta_\ell) \right] = e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

De esta forma se puede obtener la amplitud de scattering, a partir de ella (elevándola al cuadrado) la sección eficaz diferencial e integrando a todos los ángulos, la sección eficaz total.

$$\begin{aligned} f_k(\theta) &= \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2\ell + 1)} e^{i\delta_\ell} \operatorname{sen}(\delta_\ell) Y_\ell^0(\theta), \\ \sigma_k &= \int \sigma_k(\theta) d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \operatorname{sen}^2(\delta_\ell). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Los desfases se calculan en función de cada problema haciendo que la función y su derivada sean continuas en el límite de zona pero, una vez encontrados, las fórmulas anteriores son genéricas. Por definición, el desfase sólo está definido cuando el módulo está comprendido entre 0 y  $\pi$ . Siempre que  $\delta_\ell(k) = (n + \frac{1}{2})\pi$  hay una contribución máxima de la onda parcial  $\ell$  a la sección eficaz. En cambio, si  $\delta_\ell(k) = n\pi$  esa onda parcial no contribuye a  $\sigma$ . También se puede comprobar que si el desfase es negativo el potencial es repulsivo y si es positivo se tiene un potencial atractivo (las fases atrasan porque la partícula queda atrapada por el potencial momentáneamente).

### 3.2. Cálculo de los desfases

Una vez introducida la teoría necesaria se pueden calcular los desfases en este problema concreto de potencial tipo delta tridimensional. De nuevo se van a usar coordenadas adimensionales para simplificar los cálculos. Con esta elección del potencial singular la ecuación de Schrödinger que hay que resolver toma la forma:

$$-\nabla^2\psi(\vec{r}, t) - A\delta(r - r_0)\psi(\vec{r}, t) = i\frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (3.14)$$

La simetría del problema sigue siendo radial de modo que se resolverá en coordenadas esféricas. De este modo, la ecuación (3.14) toma la forma:

$$\begin{aligned} & - \left( \frac{\partial^2\psi(\vec{r}, t)}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi(\vec{r}, t)}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial\theta} \right. \\ & \left. + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi(\vec{r}, t)}{\partial\phi^2} \right) - A\delta(r - r_0)\psi(\vec{r}, t) = i\frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Para resolverla se usa el método de separación de variables. La solución de la función de onda tendrá una dependencia formal de tipo:

$$\psi(r, \theta, \phi, t) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)T(t). \quad (3.16)$$

Igual que en el *Capítulo 2*, el potencial no depende del tiempo de manera que se resuelve la parte temporal de manera totalmente análoga al desarrollo que se hizo allí. A la solución general que se obtenga se le debe añadir una fase que dé cuenta de la evolución temporal de los estados a través de las llamadas frecuencias de Bohr<sup>2</sup>.

$$T(t) = T_0 e^{-iE(t-t_0)} \quad \text{donde} \quad T_0 = T(t = t_0). \quad (3.17)$$

Al trabajar en el capítulo anterior con la ecuación de Schrödinger para un potencial central en un sistema tridimensional, las ecuaciones para la parte angular no tenían dependencia con la energía, de modo que el hecho de tomar ahora en consideración energías positivas no afecta a la parte angular y la solución de la misma se resuelve exactamente igual que en un potencial ligante. El resultado vuelven a ser los armónicos esféricos.

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) \propto P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\phi}. \quad (3.18)$$

---

<sup>2</sup>Es habitual ver la frecuencia de Bohr como  $\omega = \varepsilon/\hbar$ , pero nótese que aquí se está trabajando en un sistema de coordenadas adimensionales.



El cambio reside en la resolución de la parte radial. Al añadir la constante de separación  $\lambda$  en la ecuación original se puede trabajar con la parte radial, de forma que la ecuación a resolver toma la forma:

$$\frac{r^2}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2r}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} + r^2 (A \delta(r - r_0) + E) = \ell(\ell + 1). \quad (3.19)$$

El número cuántico  $\ell$  designa nuevamente el momento angular. Si se hace el cambio de variable  $r = \beta x$  se debe aplicar la regla de la cadena como sigue (teniendo en cuenta el abuso de notación al seguir designando por  $R$  a la función que ahora depende únicamente de la variable  $x$ ):

$$\frac{dR(r)}{dr} = \frac{dR}{dx} \frac{1}{\beta}, \quad \frac{d^2 R(r)}{dr^2} = \frac{1}{\beta^2} \frac{d^2 R}{dx^2}. \quad (3.20)$$

Al sustituir estas dos relaciones en (3.19) se debe operar teniendo en cuenta las propiedades de la delta<sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} x^2 \frac{d^2 R(x)}{dx^2} + 2x \frac{dR(x)}{dx} + \beta^2 x^2 [A \delta(\beta x - r_0) + E] R(x) &= \ell(\ell + 1) R(x), \\ x^2 \frac{d^2 R(x)}{dx^2} + 2x \frac{dR(x)}{dx} + \beta^2 x^2 \left[ \frac{A}{\beta} \delta\left(x - \frac{r_0}{\beta}\right) + E \right] R(x) &= \ell(\ell + 1) R(x), \\ \frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dR(x)}{dx} + \left[ A \beta \delta\left(x - \frac{r_0}{\beta}\right) + \beta^2 E - \frac{\ell(\ell + 1)}{x^2} \right] R(x) &= 0. \end{aligned}$$

Para simplificar el resultado hay que tener en cuenta que interesan los puntos regulares en los que el término de la delta se anula. Por este motivo, en los desarrollos siguientes no aparecerá ese término. Si se hace el cambio de variable  $R(x) = x^b y(x)$  y se opera se llega al resultado:

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} (2b + 2) \frac{dy(x)}{dx} + y(x) \left[ \beta^2 E + \frac{b(b - 1) + 2b - \ell(\ell + 1)}{x^2} \right] y(x) = 0. \quad (3.21)$$

El objetivo de estos cambios de variable es poder transformar la ecuación recién calculada en una ecuación de Bessel de solución conocida. Si se compara la expresión (3.21) con

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy(x)}{dx} + y(x) \left[ 1 - \left( \frac{\nu}{x} \right)^2 \right] y(x) = 0, \quad (3.22)$$

se ve que  $b = -1/2$  y por tanto,  $R(x) = x^{-1/2} y(x)$ . Como se especificó al comienzo del capítulo interesan los estados no ligados de este sistema ( $E > 0$ ).

---

<sup>3</sup> $\delta(ax - 1) = |a| \delta\left(x - \frac{1}{a}\right)$

En consecuencia se puede eliminar otro grado de libertad fijando  $\beta^2 E = 1$  para que la ecuación (3.21) se reduzca a la ecuación de Bessel:

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy(x)}{dx} + y(x) \left[ 1 - \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{x^2} \right] y(x) = 0. \quad (3.23)$$

De esta manera se puede concretar la forma de las constantes introducidas en los cambios de variable:  $\nu = \ell + 1/2$ ,  $\beta = 1/\sqrt{E}$ . La solución es una combinación lineal de funciones de Bessel de primera y segunda especie:

$$y(x) = c_1 J_{\ell+\frac{1}{2}}(x) + c_2 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(x). \quad (3.24)$$

Si se deshacen los cambios de variable se puede expresar la solución anterior en función de la variable  $r$ :

$$R(r) = (r\sqrt{E})^{-\frac{1}{2}} \left[ C_1 J_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}) + C_2 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}) \right]. \quad (3.25)$$

Este resultado para la ecuación radial habrá que aplicarlo a las dos regiones definidas en nuestro sistema igual que se hizo en el caso de estados ligados.

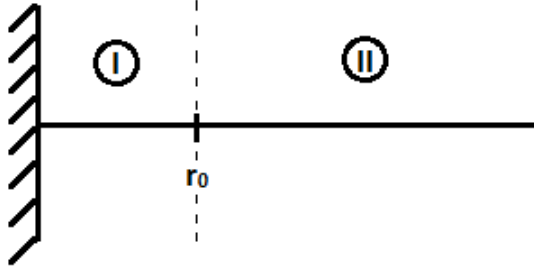


Figura 3.2: Distribución de regiones en el sistema.

Las funciones de Neumann divergen en el origen, lo que implica que para obtener una solución físicamente aceptable de la función de onda  $\psi$  es necesario hacer  $C_2 = 0$  en la región I que verifica  $0 < r < r_0$ . Teniendo en cuenta este comportamiento la solución de la parte radial toma la forma:

$$R(r) = \begin{cases} C_1 (r\sqrt{E})^{-\frac{1}{2}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}), & \text{si } 0 < r < r_0 \\ (r\sqrt{E})^{-\frac{1}{2}} \left[ D_1 J_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}) + D_2 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}) \right], & \text{si } r > r_0. \end{cases} \quad (3.26)$$

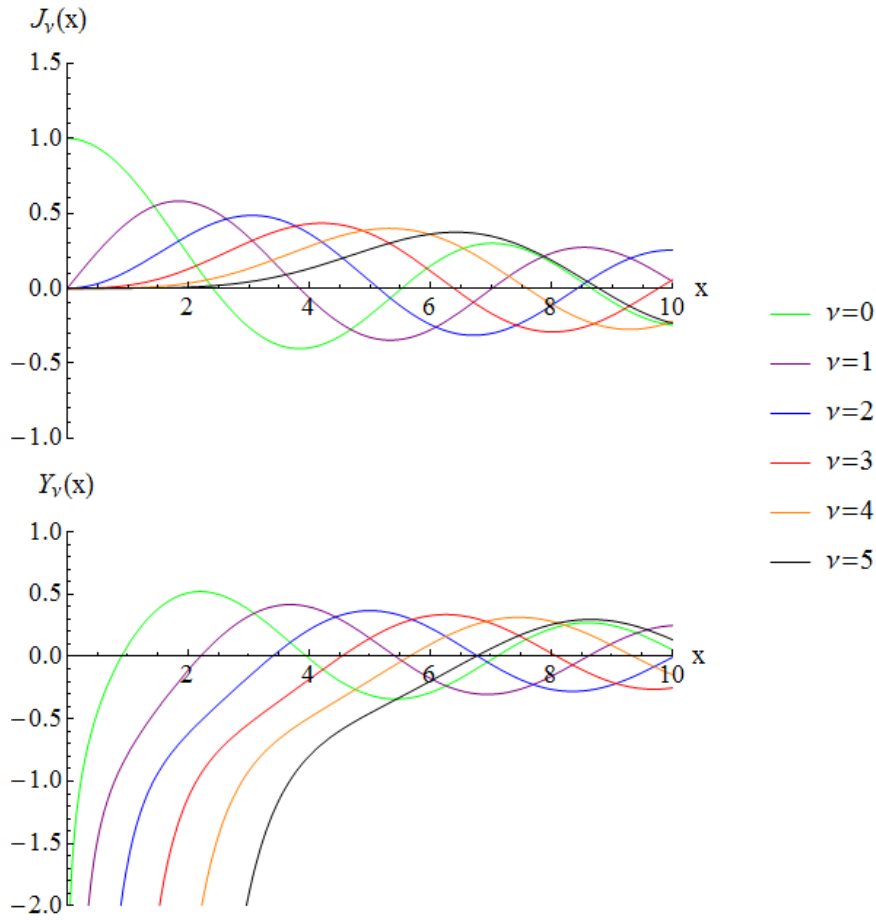


Figura 3.3: Comportamiento típico de algunas funciones de Bessel.

Una vez obtenida la solución se deben aplicar condiciones de contorno para fijar constantes. Para simplificar los cálculos se puede redefinir la solución (3.26) teniendo en cuenta que dividir todas las expresiones por la constante  $C_1$  no varía el comportamiento de las mismas. El único cambio que se produce es que aparece una constante de normalización  $N$ .

$$R(r) = \frac{1}{N} \begin{cases} (r\sqrt{E})^{-\frac{1}{2}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}), & \text{si } 0 < r < r_0 \\ (r\sqrt{E})^{-\frac{1}{2}} [DJ_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}) + FY_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E})], & \text{si } r > r_0. \end{cases} \quad (3.27)$$

Si se aplica la continuidad en  $r_0$  se obtiene la condición:

$$J_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{E}) = DJ_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{E}) + FY_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{E}). \quad (3.28)$$

La segunda condición puede obtenerse teniendo en cuenta que al trabajar con potenciales que involucran deltas de Dirac hay que aplicar la condición de discontinuidad en la primera derivada en el punto  $r = r_0$ . Si se denomina  $u(r) = rR(r)$  y se integra la ecuación radial en un entorno del punto de interés  $r_0$  se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{du}{dr}(r_0^+) - \frac{du}{dr}(r_0^-) = -Au(r_0). \quad (3.29)$$

Si se aplica esta expresión a la solución hallada anteriormente para  $R(r)$  y, por comodidad al tratar los resultados, se designa  $\varsigma = r_0\sqrt{E}$  se obtiene :

$$\begin{aligned} & \left[ \varsigma J'_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) + \frac{1}{2}J_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) \right] D + \left[ \varsigma Y'_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) + \frac{1}{2}Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) \right] F \\ &= \left[ -Ar_0 + \frac{1}{2} \right] J_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) + \varsigma J'_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Esta última ecuación unida a (3.28) forma un sistema no homogéneo de dos ecuaciones lineales. Si se resuelve el sistema y se obtienen esos coeficientes  $D$  y  $F$  se puede calcular mediante el método de desfases los estados de scattering del sistema.

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \varsigma J'(\varsigma) + \frac{1}{2}J_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) & \varsigma Y'_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) + \frac{1}{2}Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) \\ J_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) & Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ F \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (-Ar_0 + \frac{1}{2}) J_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) + \varsigma J'_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) \\ J_{\ell}(\varsigma) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Como la matriz cuadrada de la ecuación anterior es invertible (de hecho el determinante es  $-2/\pi$ ) se pueden despejar los coeficientes  $D$  y  $F$  que determinan de manera exacta la solución radial del sistema. Operando con la expresión anterior (la matriz de los coeficientes será el producto de la inversa de la matriz cuadrada  $2 \times 2$  por la matriz del término derecho de la ecuación) y simplificando se llega a:

$$\begin{pmatrix} D \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{A\pi\varsigma J_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma)Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma)}{2\sqrt{E}} \\ \frac{-A\pi\varsigma J_{\ell+\frac{1}{2}}^2(\varsigma)}{2\sqrt{E}} \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

Si se deshace el cambio de variable realizado se llega a la solución:

$$\begin{pmatrix} D \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{A\pi r_0 J_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{E})Y_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{E})}{2} \\ \frac{-A\pi r_0 J_{\ell+\frac{1}{2}}^2(r_0\sqrt{E})}{2} \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

En [28] se encuentra que para el scattering en tres dimensiones los desfases se calculan evaluando el cociente  $F/D$  como sigue

$$\tan \delta_\ell = -\frac{F}{D}. \quad (3.34)$$

Según el resultado encontrado en (3.33), se obtiene el desfase creado para este potencial:

$$\tan \delta_\ell = \frac{A\pi r_0 J_{\ell+\frac{1}{2}}^2(r_0\sqrt{E})}{A\pi r_0 J_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{E})Y_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{E}) + 2}. \quad (3.35)$$

Si se representa el desfase  $\delta_\ell$  frente a la energía de los estados se obtiene la Figura 3.4 para los primeros órdenes del parámetro  $\ell$ .

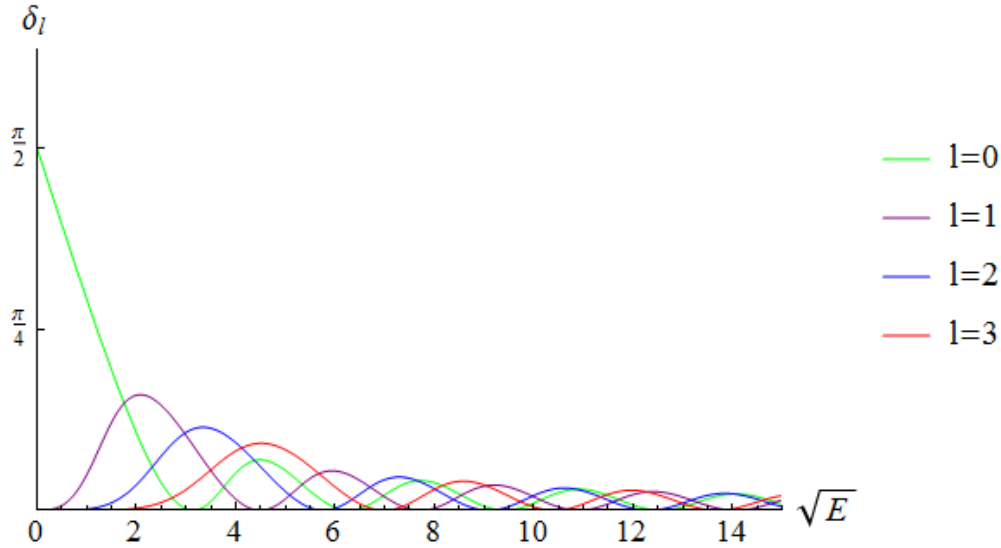


Figura 3.4: Desfase entre onda incidente y dispersada. Se ha tomado  $A = 1$ ,  $r_0 = 1$ .

Como se puede comprobar es una función oscilante (debido al comportamiento de las funciones de Bessel de las que depende la expresión de los desfases) que se atenúa conforme aumenta la energía. Los valores positivos de la energía que se están considerando en el caso de scattering unido a la forma explícita del potencial  $V(r) = -A\delta(r - r_0)$  para  $A > 0$  implican que el cuadrante de interés es el primero. Ahí el desfase es positivo, como corresponde a un potencial atractivo.

Al aumentar el valor de la constante  $A$  de la delta la función se modifica significativamente. Las oscilaciones que se ven en la Figura 3.4 siguen apareciendo en todos los casos siempre respetando la posición de los mínimos. Además aumenta el rango de valores posibles para  $\delta_\ell$  comparado con el comportamiento cuando  $A = 1$ , llegando a los valores asintóticos de la función arcotangente. También se observa que la atenuación entre las distintas oscilaciones es más acusada que en el caso  $A = 1$ .

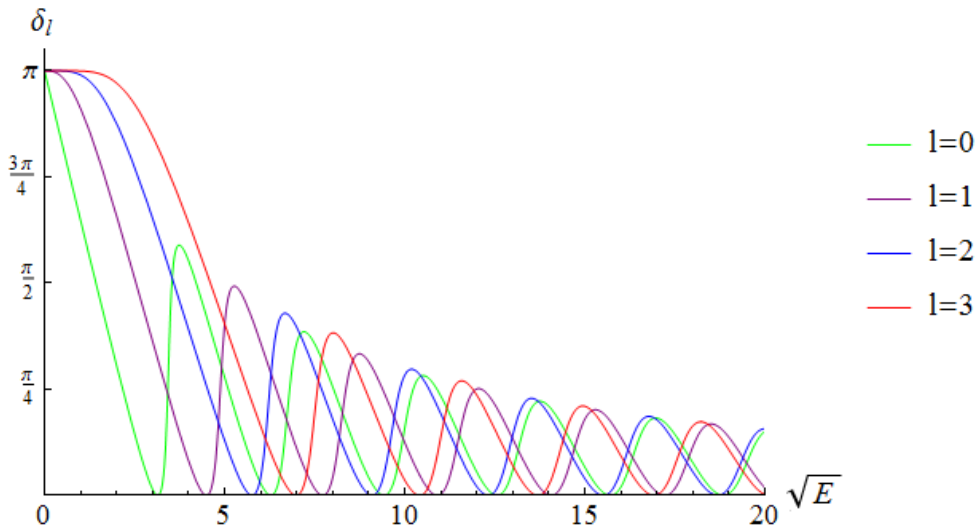


Figura 3.5: Desfasaje entre onda incidente y dispersada. Se ha tomado  $A = 10$ ,  $r_0 = 1$ .

Hay dos factores importantes en el análisis: en primer lugar, el desfase alcanzará un valor máximo en su rango cuando el argumento de la arcotangente que lo define alcance valores suficientemente grandes. En segundo lugar, cuando el denominador de la expresión (3.35) se anule, aparecerán divergencias en el argumento y el desfase alcanzará los valores asintóticos (téngase en cuenta que se ha representado la expresión en la primera hoja de Riemann de la función arcotangente ya que es multivaluada). A continuación se va a presentar con más detalle estos factores.

En principio, la función arcotangente que describe a  $\delta_\ell$  está definida entre los valores asintóticos de  $-\pi/2$  y  $\pi/2$  pero en la Figura 3.4 se comprueba que para los casos  $\ell \neq 0$  el valor máximo al que llegan las oscilaciones está muy por debajo de estos valores asintóticos. Esto es así porque en esos casos el argumento de la función  $\delta_\ell$  tiene un rango pequeño si  $A = 1$ , de manera que la función arcotangente representada en ese caso se limita a una pequeña región situada en torno al origen y por tanto, no es suficiente para llegar a los valores asintóticos.

Si aumenta la constante  $A$  de acoplamiento de la delta, el argumento de la arcotangente tendrá un rango más amplio de valores y por ello, la  $\delta_\ell$  podrá llegar a los valores extremos. Esta tendencia se puede ver en la Figura 3.6 para  $\ell = 1$  (el resto de valores  $\ell$  mayores a 1 se comportan de manera totalmente análoga).

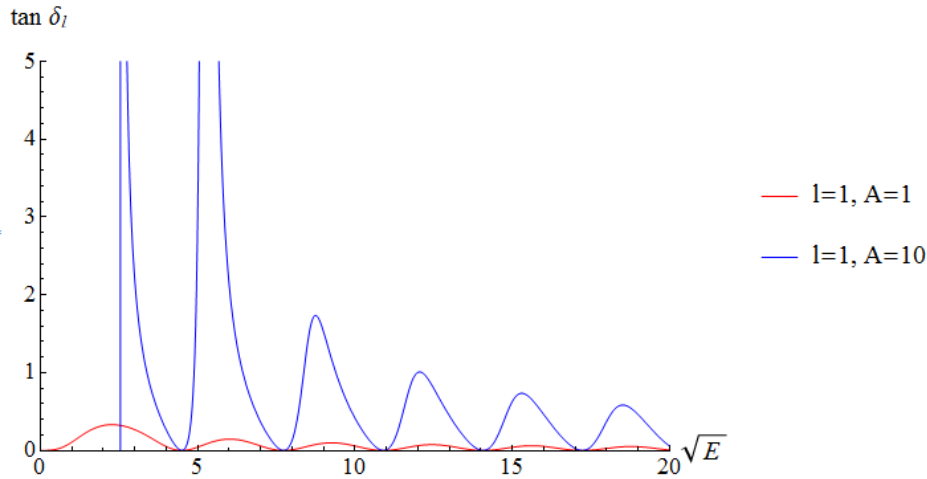


Figura 3.6: Argumento de la arcotangente si  $A = 1$ ,  $r_0 = 1$  para  $\ell = 1$ .

Un caso especial es  $\ell = 0$ . En ese caso se puede comprobar que la función  $\tan \delta_\ell$  diverge en el origen si  $A = 1$ .

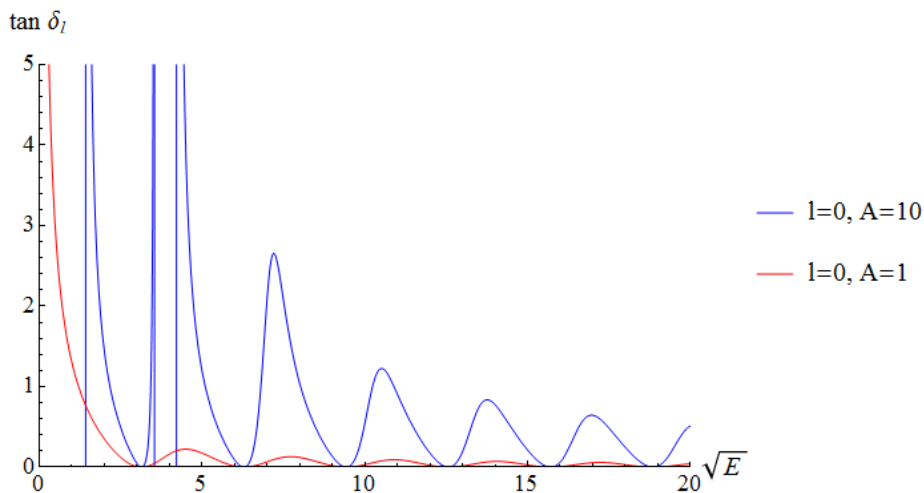


Figura 3.7: Comparativa del rango del argumento de la arcotangente en la expresión de  $\delta_\ell$  en el caso  $A = 1$  y  $A = 10$  para  $\ell = 0$  en la configuración  $r_0 = 1$ .

Por ese motivo si se representa el desfase en función de la energía (Figura 3.4) se alcanza el valor  $\pi/2$  en el origen y luego ya se comporta de forma similar al resto de valores de momento angular. Al aumentar el valor de  $A$  de nuevo surgen más divergencias en la tangente del desfase que se traducirán en picos de valor máximo en la representación de los desfases (téngase en cuenta que en la Figura 3.5 el desfase va entre  $0$  y  $\pi$  por definición pero, como la expresión es una arcotangente, se ha definido en la primera hoja de Riemann entre  $-\pi/2$  y  $\pi/2$ . Como se ha tomado el convenio de que el desfase sea positivo en este potencial atractivo, se ha realizado una traslación de  $\pi/2$  a los valores de la función). En cualquier caso, la expresión (3.35) presentará un comportamiento suave siempre que el denominador no se anule porque el producto  $\pi J_{\ell+\frac{1}{2}} Y_{\ell+\frac{1}{2}}$  puede alcanzar valor  $-2$ , especialmente en los casos en los que la constante de interacción de la delta toma un valor grande, ya que aumenta de manera significativa el rango de la función definida.

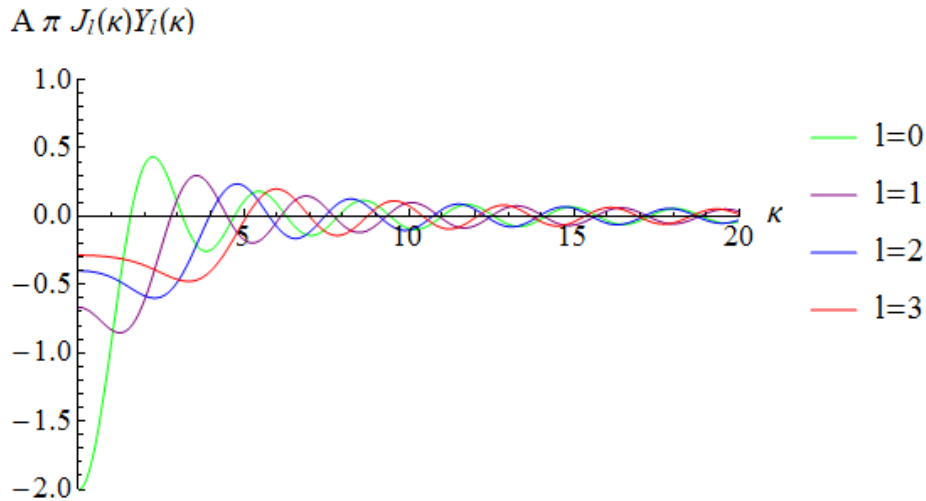


Figura 3.8: Comportamiento acotado de la expresión del denominador de la fórmula de desfases  $A = 1, r_0 = 1$ .

En la Figura 3.8 se ve cómo para  $A = 1$  sólo en el origen se anula el denominador para  $\ell = 0$  y por eso se ve que en (3.4) el comportamiento del desfase es suave en todo el dominio para todos los momentos angulares salvo para ese caso concreto. Sin embargo, para  $A = 10$  (Figura 3.9) el denominador se anula más veces. Para  $\ell = 0$  hay tres puntos de divergencias y por eso en la gráfica (3.5) hay tres puntos que alcancen el valor  $\pi/2$ , exactamente en los mismos valores en los que el denominador se hace cero.



El comportamiento suave y el hecho de que a energías bajas se alcanzan valores máximos del desfase por la contribución de la función arcotangente que se ha explicado anteriormente queda resumido en la Figura 3.10 para  $\delta_\ell$ .

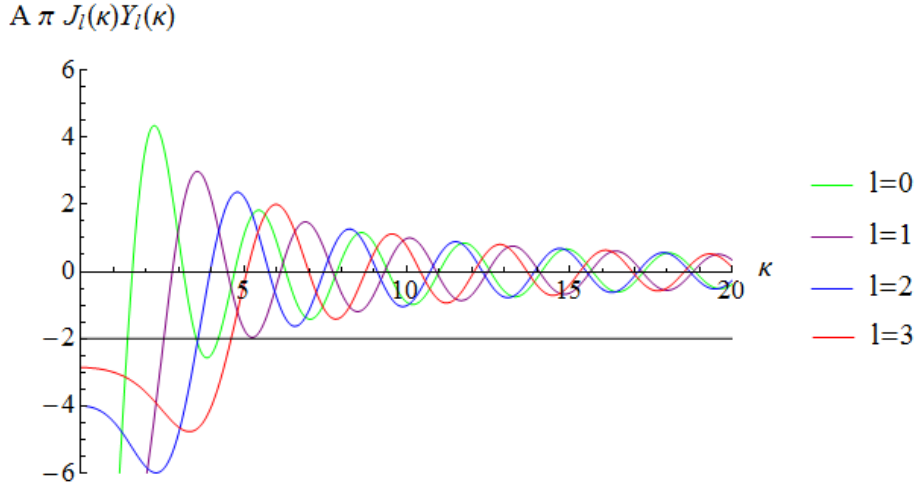


Figura 3.9: Comportamiento acotado de la expresión del denominador de la fórmula de desfases  $A = 10, r_0 = 1$ .

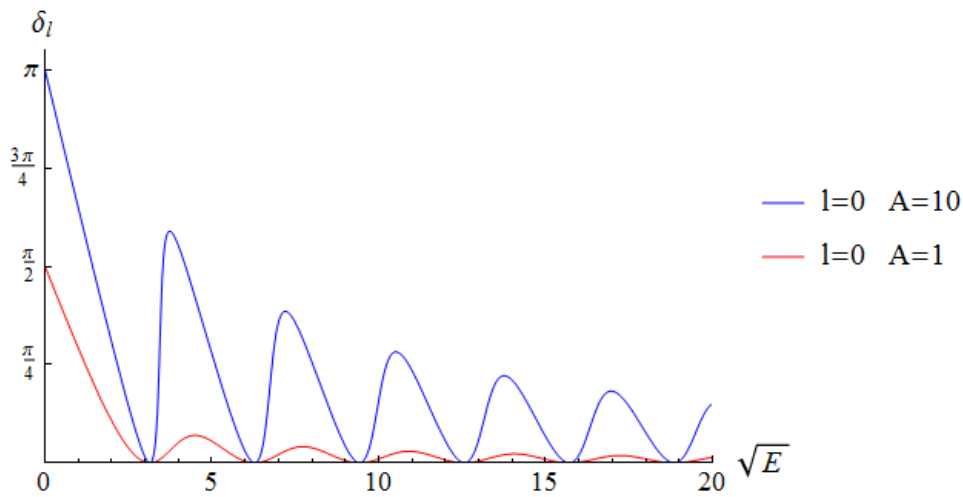


Figura 3.10: Relevancia de la  $A$  en el cálculo de desfases en el caso  $\ell = 0$  y  $r_0 = 1$ .

Finalmente, para terminar este capítulo cabe discutir el comportamiento del sistema cuando el potencial sea una barrera en vez de un pozo.

El potencial a estudiar sería  $V(r) = A\delta(r - r_0)$ . Se repiten los cálculos y se llega a la misma solución hallada anteriormente para  $R(r)$  y la matriz de scattering obtenida sería<sup>4</sup>

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \varsigma J'(\varsigma) - \frac{1}{2}J_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) & \varsigma Y'_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) - \frac{1}{2}Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) \\ J_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) & Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ F \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (Ar_0 - \frac{1}{2}) J_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) + \varsigma J'_{\ell+\frac{1}{2}}(\varsigma) \\ J_{\ell}(\varsigma) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.36)$$

La matriz cuadrada de la ecuación anterior es invertible por lo que se pueden despejar los coeficientes  $D$  y  $F$  que determinan de manera exacta la solución radial del sistema. Usando el mismo cálculo descrito anteriormente con más detalle para el potencial atractivo se llega a una expresión de los desfases:

$$\tan \delta_{\ell} = \frac{A\pi r_0 J_{\ell+\frac{1}{2}}^2(r_0\sqrt{E})}{A\pi r_0 J_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{E})Y_{\ell+\frac{1}{2}}(r_0\sqrt{E}) - 2}. \quad (3.37)$$

Si se representa el desfase  $\delta_{\ell}$  frente a la energía de los estados se obtiene la Figura 3.11 para los primeros órdenes del parámetro  $\ell$ .

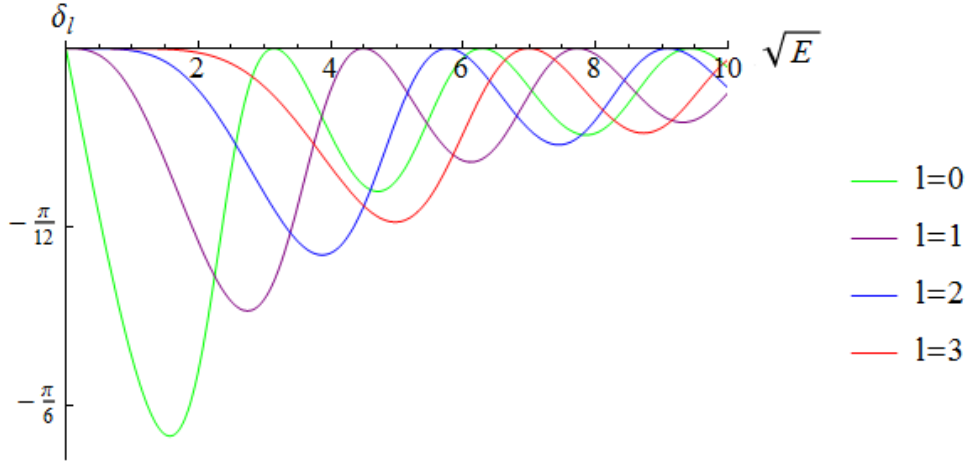


Figura 3.11: Desfase entre onda incidente y dispersada para un potencial tipo barrera. Se ha tomado  $A = 1$ ,  $r_0 = 1$ .

<sup>4</sup>En la condición de la discontinuidad de la derivada primera usada en el caso anterior del potencial atractivo se debe cambiar el signo de la  $A$  también, no sólo en las ecuaciones de Schrödinger.

Como se puede comprobar es nuevamente una función oscilante que se atenúa conforme aumenta la energía. Los valores positivos de la energía que se están considerando en el caso de scattering unido a la forma explícita del potencial  $V(r) = A\delta(r - r_0)$  para  $A > 0$  implican que el cuadrante de interés es el cuarto. Ahí el desfase es negativo. El cambio de signo viene motivado por el paso de un potencial atractivo a uno repulsivo.

Al aumentar el valor de la constante  $A$  de acoplamiento de la delta la función se modifica levemente.

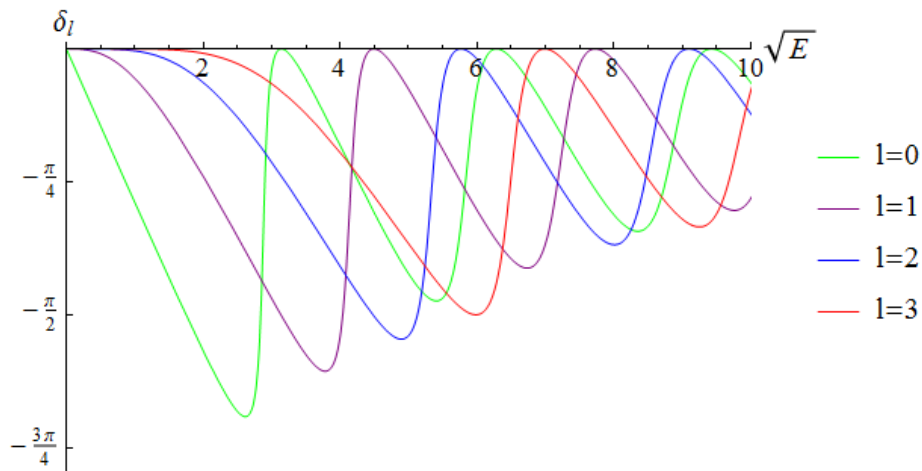


Figura 3.12: Desfase entre onda incidente y dispersada. Se ha tomado  $A = 10$ ,  $r_0 = 1$ .

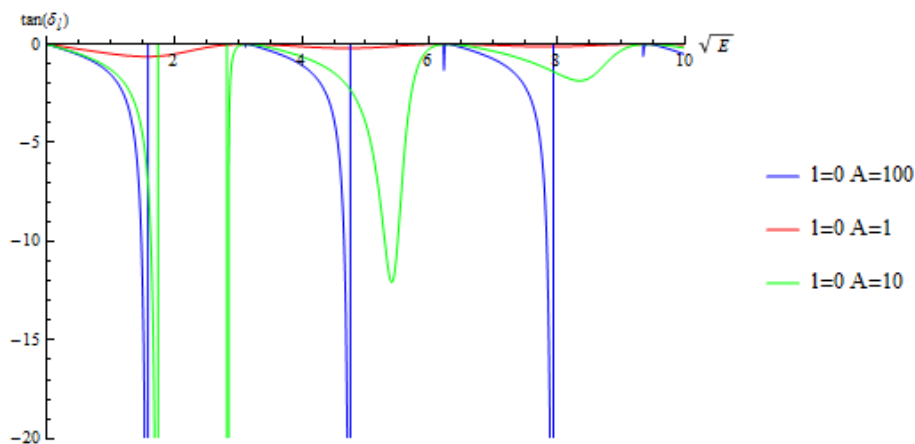


Figura 3.13: Comparativa del rango del argumento de la arcotangente en la expresión de  $\delta_l$  en el caso  $A = 1$ ,  $A = 10$  y  $A = 100$  para  $l = 0$ .

Aumenta el rango de valores posibles (en módulo) para  $\delta_\ell$  comparado con el comportamiento cuando  $A = 1$  y seguirán estando las oscilaciones en los mismos intervalos aunque en ocasiones se alcancen valores asintóticos (el denominador de la expresión se anulará). La misma discusión que se ha realizado con el otro potencial acerca de cómo el rango del argumento de la arcotangente (que aumentará según lo haga el valor de  $A$ ) que define el desfase determina los puntos en los que  $\delta_\ell$  toma valores máximos de  $-\pi/2$  es válida en este caso (como se recoge en la Figura 3.13). Todos estos factores se resumen en la Figura comparativa 3.14.

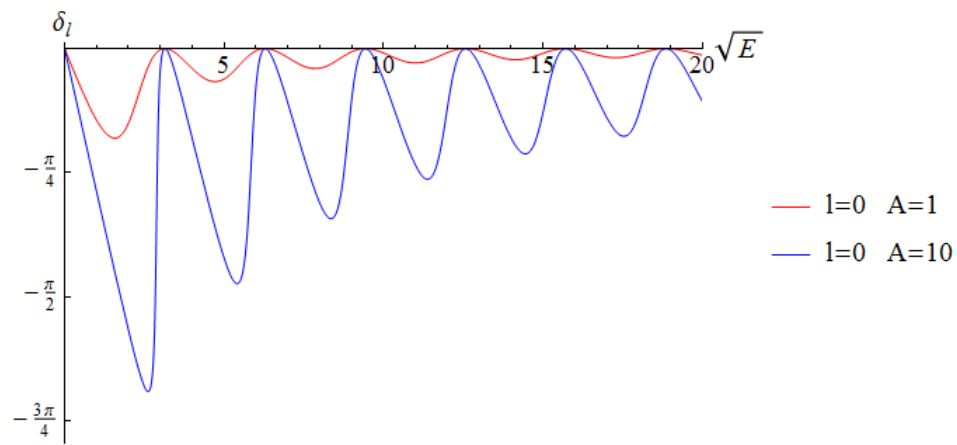


Figura 3.14: Relevancia de la  $A$  en el cálculo de desfases en el caso  $\ell = 0$ .

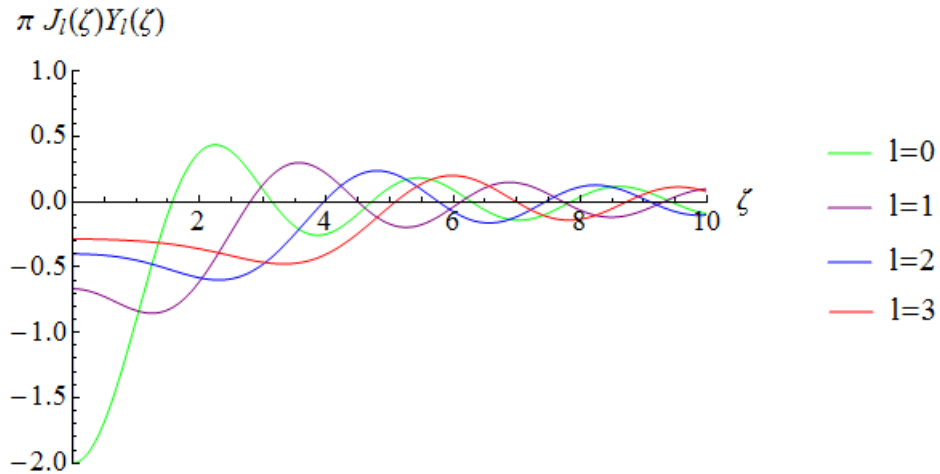


Figura 3.15: Comportamiento acotado de la expresión del denominador de la fórmula de desfases para un potencial tipo barrera cuando  $A = 1$  y  $r_0 = 1$ .

En cualquier caso, la expresión (3.37) presenta un comportamiento suave para  $A = 1$  ya que el denominador no se anula porque el producto  $\pi J_{\ell+\frac{1}{2}} Y_{\ell+\frac{1}{2}}$  está acotado superiormente en un valor inferior a 2. Para  $A = 10$  sí que se alcanza el valor 2 y aparecen divergencias. En esos puntos donde hay ceros en el denominador la gráfica de los desfases alcanzará valores de módulo  $\pi/2$ .

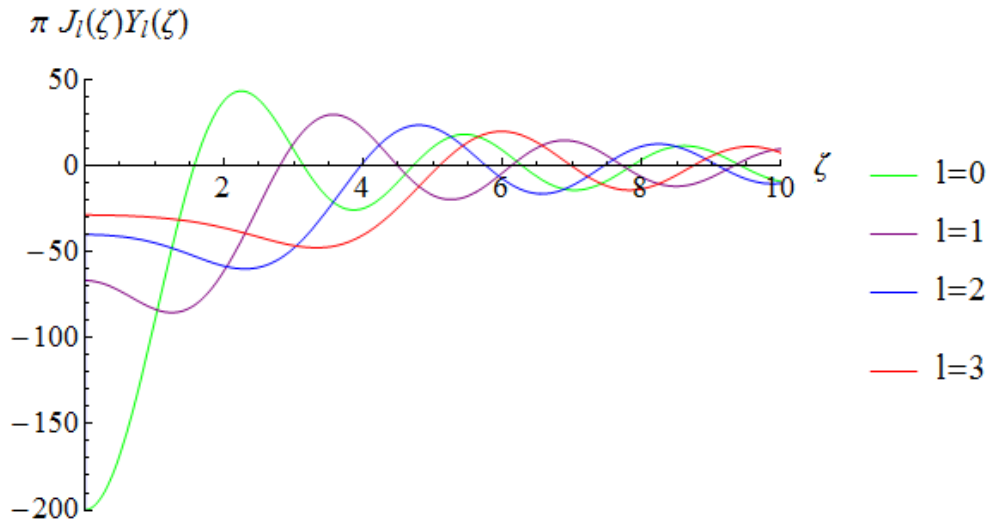


Figura 3.16: Comportamiento acotado de la expresión del denominador de la fórmula de desfases para un potencial tipo barrera cuando  $A = 10$  y  $r_0 = 1$ .

### 3.3. Conexión con QFT

Tras el estudio de los desfases realizado en este capítulo se puede concluir que para el régimen de bajas energías (útil en contribuciones a cálculos como la energía de Casimir) el desfase correspondiente a  $\ell = 0$  es el dominante.

En posteriores capítulos se va a comprobar la importancia de los desfases en el ámbito de la teoría cuántica de campos en presencia de *backgrounds* (baños clásicos) u objetos extensos. Los efectos de las condiciones de contorno juegan un papel importante en el efecto Casimir, agujeros negros cuánticos, teoría de cuerdas... porque estos fenómenos de ligadura determinan la estructura del vacío cuántico en la QFT.

Los estados donde la interacción Casimir es repulsiva son relevantes tanto para aplicaciones técnicas en dispositivos micro mecánicos como MEMS como para un análisis más preciso de efectos microgravitatorios. Actualmente hay evidencias de desviaciones de la ley de Newton a escalas submilimétricas [29, 30, 31] y se están efectuando estudios para separar las contribuciones gravitatorias de las de Casimir a esas escalas [32, 33, 34].

Las condiciones de contorno aparecen en QFT a través de interacciones con la superficies y se pueden modelizar en muchas ocasiones añadiendo un término proporcional a una delta de Dirac en el lagrangiano. Actualmente hay un gran interés en el estudio de potenciales con dos deltas [11] (se calcula la fuerza de Casimir inducida por fluctuaciones cuánticas de un campo escalar masivo entre dos planos semitransparentes calculando la función de Green reducida y trabajando con el tensor energía momento) o una delta y una delta prima [10] para la descripción de planos parcialmente transparentes y el cómputo de la energía de interacción de Casimir entre dos cuerpos<sup>5</sup>.

También se pueden consultar los trabajos de Fosco et al. que derivan la energía de Casimir inducida por las fluctuaciones de campos entre dos espejos de anchura finita [35]. Milton extendió la idea al contexto electromagnético para describir la permitividad y la permeabilidad en términos de potenciales tipo delta [36].

En el trabajo de Asorey y Muñoz Castañeda [37] se muestra un método para identificar qué condiciones de contorno generan fuerzas de Casimir atractivas o repulsivas entre dos planos paralelos y un campo escalar no masivo y se muestra cómo las fuerzas atractivas corresponden a condiciones de contorno periódicas y las repulsivas a condiciones antiperiódicas.

Se pueden consultar otras referencias en caso de interés para ver las fuerzas repulsivas en planos dieléctricos [38] y entre una placa metálica con un agujero y una aguja apuntando a su centro [39]. Para todos estos cálculos las expresiones de los desfasajes son relevantes.

---

<sup>5</sup>Esta interacción será estudiada más detalladamente en el *Capítulo 5*.

# Capítulo 4

## Dos esferas no relativistas

En este capítulo se aplicará el cálculo realizado en el *Capítulo 2* y *3* para hallar los estados ligados y de scattering de la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones para el caso en el que haya dos singularidades tipo delta de Dirac con simetría radial concéntricas. El potencial a estudiar será, por tanto,

$$V(r) = A\delta(r - r_1) + B\delta(r - r_2), \quad (4.1)$$

donde los radios  $r_1$  y  $r_2$  son arbitrarios y, sin pérdida de generalidad, se puede considerar  $r_1 < r_2$ . Se estudiarán por separado los casos en los que las constantes  $A$  y  $B$  que modulan las deltas definan, por medio de su signo, potenciales atractivos o repulsivos.

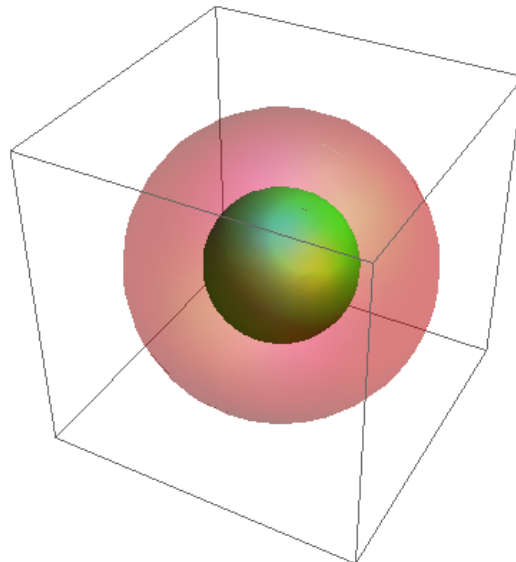


Figura 4.1: Potencial bajo estudio para dos singularidades tipo delta concéntricas.

## 4.1. Cálculo de estados ligados

El procedimiento es análogo al realizado en el *Capítulo 2* dentro del marco no relativista para el caso de una singularidad representada por una corteza esférica. Téngase en cuenta que ni la parte temporal ni la parte angular sufren modificaciones porque el único cambio añadido en este caso (que es introducir una delta más al potencial) sólo afecta a la parte radial. De ahí que se pueda generalizar el resultado usando las expresiones obtenidas en el caso de una delta.

En su momento se obtuvo que la solución para la parte radial era una combinación de funciones de Bessel a las que se les imponía condiciones de finitud, continuidad y discontinuidad de la derivada primera para fijar las constantes involucradas en la solución. Cuando la delta definía (a través de la constante que la acompaña) un potencial atractivo, es decir, cuando  $V(r) = -A\delta(r - r_0)$  la solución para encontrar los estados ligados era:

$$R(r) = (r\sqrt{-E})^{-\frac{1}{2}} \left[ C_1 I_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{-E}) + D_2 K_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{-E}) \right]. \quad (4.2)$$

Por otra parte, cuando se estudiaban los estados de scattering para ese potencial (y los mismos resultados eran aplicables al potencial repulsivo tipo barrera) se obtenía una solución diferente:

$$R(r) = (r\sqrt{E})^{-\frac{1}{2}} \left[ C_1 J_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}) + C_2 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}) \right]. \quad (4.3)$$

Con dos singularidades la ecuación radial a resolver que surge de sustituir en la ecuación de Schrödinger general las coordenadas esféricas es:

$$r^2 \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + 2r \frac{dR(r)}{dr} + [\pm A\delta(r - r_1) \pm B\delta(r - r_2) + E] r^2 R(r) = \ell(\ell+1)R(r) \quad (4.4)$$

donde el signo + se corresponde con la ecuación a resolver en caso de potencial tipo pozo (habrá estados ligados con  $E < 0$  y de scattering con  $E > 0$ ) y el - en caso de potencial tipo barrera (sólo habrá estados de scattering). Si se definen las regiones en las que se divide el problema se ve que ahora son tres (véase la Figura 4.2), lo que implica que serán necesarias más condiciones para determinar las constantes de la solución de manera única. Una vez obtenidas las soluciones de la ecuación diferencial (conocidos los resultados del caso de una delta se puede generalizar a dos deltas simplemente con la superposición, en las distintas regiones, de las expresiones oportunas referidas en las ecuaciones (4.2) y (4.3)) se deben hallar las constantes de integración.



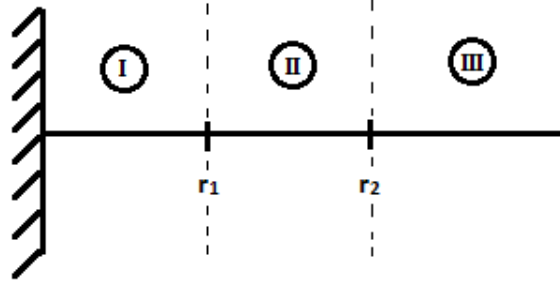


Figura 4.2: Regiones de interés en las que se divide el problema.

Para ello se deben aplicar las condiciones de contorno de continuidad y discontinuidad de la derivada primera en los puntos en los que están centrados las deltas. La condición de continuidad debe aplicarse exactamente igual que en *Capítulo 2*. Para la discontinuidad de la derivada primera se integra la ecuación (4.4) en un entorno de los puntos donde se encuentran las deltas  $(r_i - \eta, r_i + \eta)$  y luego, exactamente igual que en el caso de una delta, debe estudiarse el límite cuando  $\eta \rightarrow 0$ . En este caso, cuando se esté estudiando el punto  $r_i$  la delta centrada en el otro punto se anulará y volverán a obtenerse las mismas ecuaciones para una delta que se conseguían en los capítulos anteriores y se recogen a continuación. Como hay tres regiones delimitadas por las dos posiciones de las singularidades se obtendrán cuatro condiciones de contorno:

$$\begin{aligned} R_I(r_1) &= R_{II}(r_1) \\ \frac{dR_{II}}{dr}(r_1^+) - \frac{dR_I}{dr}(r_1^-) &= \mp AR_I(r_1) \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} R_{II}(r_2) &= R_{III}(r_2) \\ \frac{dR_{III}}{dr}(r_2^+) - \frac{dR_{II}}{dr}(r_2^-) &= \mp BR_{III}(r_2) \end{aligned} \quad (4.6)$$

donde el signo  $-$  se impondrá en los casos en los que el potencial a estudiar sea atractivo ( $A, B < 0$ ) y el signo  $+$  en los casos en los que sea repulsivo ( $A, B > 0$ ).

En los siguientes apartados se resolverá esta ecuación para distintas situaciones físicas dependiendo del signo que tomen las deltas en el potencial.

### 4.1.1. Potencial con $A < 0$ y $B < 0$

La solución general teniendo en cuenta los resultados encontrados en (4.2) y (4.3) es:

$$R(r) = (r\sqrt{-E})^{-\frac{1}{2}} \begin{cases} C_1 I_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{-E}), & \text{si } 0 < r < r_1 \\ C_2 I_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{-E}) + C_3 K_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{-E}), & \text{si } r_1 < r < r_2 \\ C_4 K_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{-E}), & \text{si } r > r_2 \end{cases} \quad (4.7)$$

Imponiendo las condiciones de contorno se llegan a las expresiones para las constantes de integración. Por razones de simplicidad en las expresiones se va a utilizar la notación  $\alpha_i = r_i\sqrt{-E}$  con  $i = 1, 2$ .

$$C_1 I_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) - C_2 I_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) + C_3 K_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) = 0 \quad (4.8)$$

$$C_4 K_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) - C_2 I_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) + C_3 K_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) = 0 \quad (4.9)$$

$$C_1 \left[ (-1 - Ar_1 - \ell) I_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) - \alpha_1 I_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_1) \right] + C_2 \left[ (1 + \ell) I_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) + \alpha_1 I_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_1) \right] \\ + C_3 \left[ (1 + \ell) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) - K_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_1) \right] = 0 \quad (4.10)$$

$$C_2 \left[ (-1 - \ell) I_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) - \alpha_2 I_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) \right] + C_3 \left[ -(1 + \ell) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) + \alpha_2 K_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) \right] \\ + C_4 \left[ -(-1 + Br_2 - \ell) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) - \alpha_2 K_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) \right] = 0. \quad (4.11)$$

De esta manera se llega a un sistema de ecuaciones algebraicas lineal y homogéneo con cuatro incógnitas. Al imponer que el determinante de los coeficientes sea nulo se obtiene la ecuación trascendente para la energía:

$$- \frac{1}{Ar_1} I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_2) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_2) + I_{\ell+\frac{1}{2}}^2(\sqrt{-E}r_1) K_{\ell+\frac{1}{2}}^2(\sqrt{-E}r_2) \\ - I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_1) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_1) I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_2) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_2) \\ - \frac{1}{Br_2} I_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_1) K_{\ell+\frac{1}{2}}(\sqrt{-E}r_1) = \frac{1}{Ar_1 Br_2} \quad (4.12)$$

Si se hace  $B$  o  $A$  igual a cero, sólo existiría una delta y se recupera la expresión que se obtuvo en la ecuación (2.57) del *Capítulo 2*. Nuevamente el resultado de la ecuación trascendente es una expresión en la que la energía sólo aparece en el argumento de las funciones de Bessel modificadas a través de  $\alpha_i = r_i\sqrt{-E}$ . El miembro izquierdo de (4.12) es una función  $F_\ell(E, r_1, r_2, A, B)$  que depende de la energía y las constantes físicas de ambas deltas (acoplamientos y posiciones) mientras que el miembro derecho, una vez elegida una configuración del sistema será una constante.

Para ver si el estado puede o no presentar estados ligados se estudia el límite cuando  $\alpha_i = r_i\sqrt{-E}$  tiendan a cero de la función  $F_\ell$ :

$$\lim_{\alpha_{1,2} \rightarrow 0} F_\ell(E, r_1, r_2, A, B) = -\frac{1}{2\ell + 1} \left[ \frac{1}{Ar_1} + \frac{1}{Br_2} \right]. \quad (4.13)$$

Ahora bien, como en el caso de una delta, al tratarse de funciones monótonas decrecientes si el límite de estas expresiones cuando el argumento tiende a cero es mayor que el valor de la constante definida por el miembro derecho de (4.12), habrá estados ligados. Es decir, hay estados ligados si se cumple:

$$-\frac{1}{2\ell + 1} \left[ \frac{1}{Ar_1} + \frac{1}{Br_2} \right] \geq \frac{1}{Ar_1 Br_2} \quad \longrightarrow \quad -(Br_2 + Ar_1) \geq 2\ell + 1 \quad (4.14)$$

donde hay que tener en cuenta que  $A, B$  son ambas constantes negativas por construcción del potencial. Si uno de los dos acoplamientos se iguala a cero se retoma la discusión del *Capítulo 2* (Figuras 2.6, 2.7, 2.8). De las condiciones anteriores se ve que en este caso el comportamiento en el origen no solo viene dado por el valor del momento angular, sino también por las características de las singularidades. La consecuencia más importante de este razonamiento es que ya no se puede asegurar que para un número cuántico  $\ell$  dado haya sólo un único corte entre las funciones que definen los dos miembros de la ecuación trascendente sino que puede haber más de uno y por ello, no se puede dar una expresión cerrada del número total de estados ligados en el sistema como se hizo para una delta en su momento.

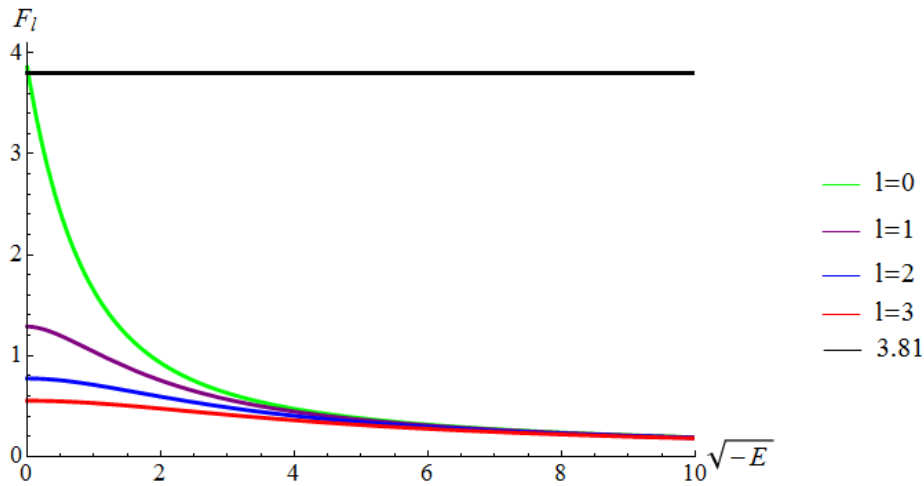


Figura 4.3: Configuración de pozos pequeños  $A = B = -0,5$  separados por una distancia pequeña  $h = 0,05$  para distintos  $\ell$ . La recta negra representa el miembro derecho de la ecuación trascendente.

Cuando el pozo es pequeño y están separadas ambas singularidades por una pequeña distancia (como se ve en la Figura 4.3) se liga un estado, y no dos como se podría pensar, uno correspondiente a cada delta. Las condiciones físicas de las singularidades lo impiden. En este caso, sólo se liga un estado para la onda  $s$  para una energía muy baja.

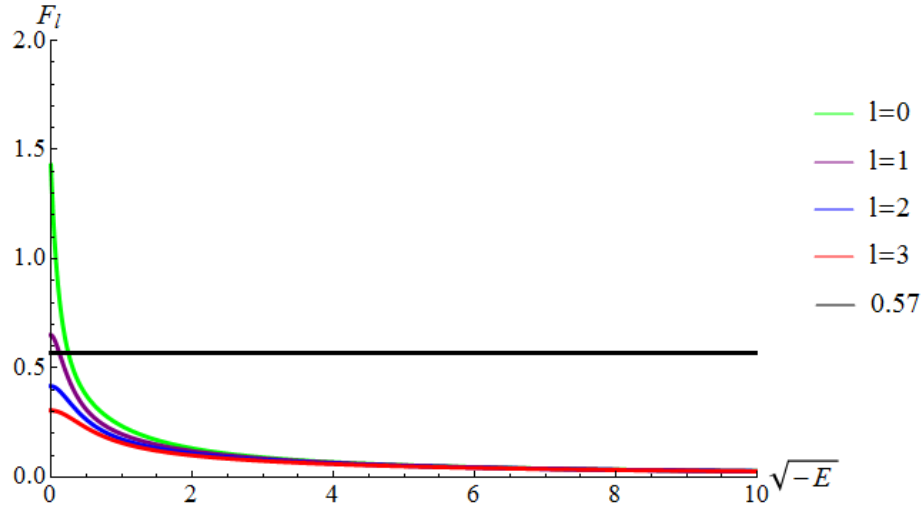


Figura 4.4: Configuración de pozos pequeños  $A = B = -0,5$  separados por una distancia grande  $h = 6$  para distintos  $l$ .

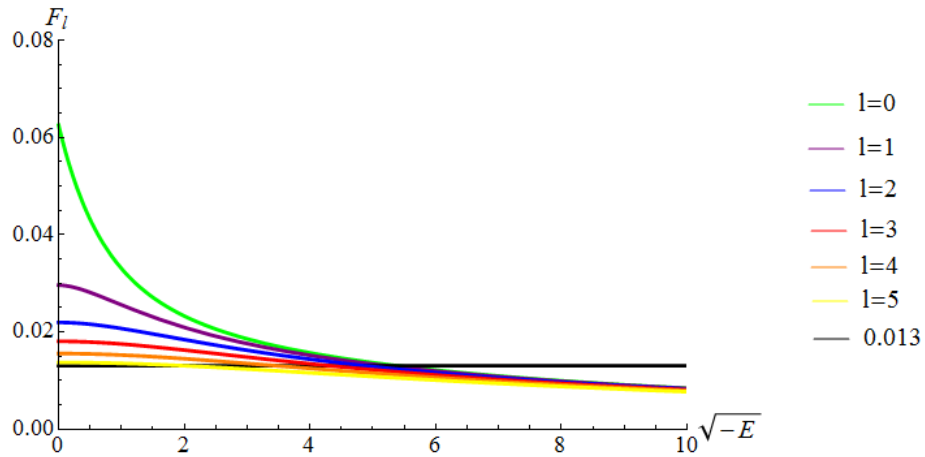


Figura 4.5: Configuración de pozos grandes  $A = B = -8$  separados por una distancia pequeña  $h = 0,2$  para distintos  $l$ .

Sin embargo, cuando los pozos son pequeños pero la distancia entre ambas singularidades es grande (situación representada en la Figura 4.4), aunque se sigue produciendo un único corte de ambas funciones para cada  $\ell$ , sí hay cortes para valores mayores del momento angular. El cómputo total de estados ligados será cuatro si se tiene en cuenta la degeneración del número cuántico involucrado. Además las energías de los estados ligados son mayores en módulo que en el caso anterior.

Otro caso posible es aquel en el que los acoplamientos de las deltas sean grandes y los pozos estén separados una pequeña distancia (Figura 4.5). Sigue habiendo un único corte para cada valor de  $\ell$  pero hay muchos más valores del momento angular en los que se producen estados ligados. Esa configuración en concreto liga estados hasta  $\ell = 5$  lo que supone un total de treinta y seis estados ligados. Nuevamente, el valor de la energía para la que se producen es mayor que en casos anteriores.

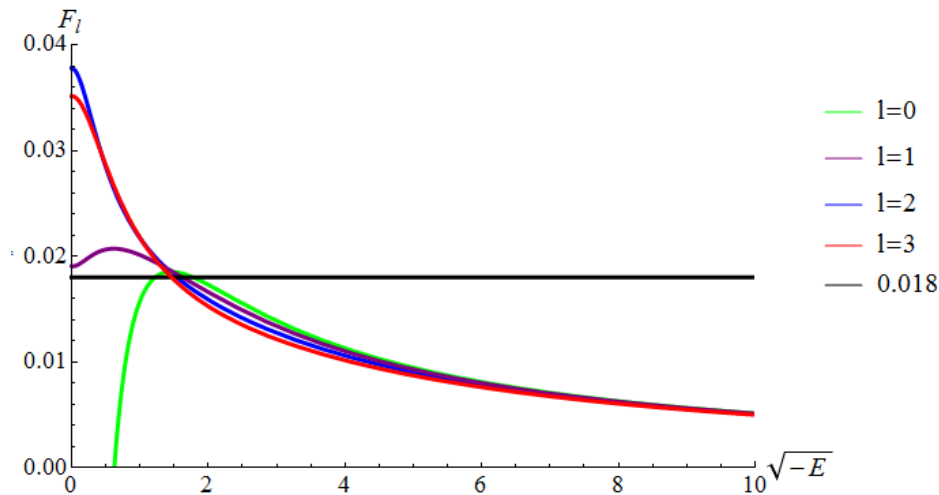


Figura 4.6: Configuración de pozos grandes  $A = B = -3$  separados por una distancia grande  $h = 5$  para distintos  $\ell$ .

La otra opción posible es que haya pozos grandes y la distancia entre las singularidades sea también grande (Figura 4.6). Es muy interesante este caso porque en  $\ell = 0$  el miembro derecho de la ecuación trascendente, que es una constante, corta a la función en dos puntos distintos. Por este motivo es difícil dar una expresión analítica cerrada para dos singularidades tipo delta. Son comportamientos que no se pueden predecir a priori y dependerán mucho de las configuraciones elegidas.

### 4.1.2. Potencial con $A > 0$ y $B < 0$

La solución general viene dada por las expresiones (4.1.1) y (4.1.2) con la salvedad de que ahora uno de los acoplamientos de las deltas es positivo y el otro negativo.

En esta configuración hay que tener en cuenta que la única singularidad que proporciona estados ligados es la que está centrada en  $r_2$ . Por muchas singularidades con acoplamiento positivo que se colocaran en una posición  $r$  menor en módulo que  $r_2$  (es decir, colocadas a su izquierda) no se van a alcanzar más estados ligados. Sí que puede eliminar alguno de los estados ligados de la delta con acoplamiento  $B$  siempre y cuando ambas singularidades estén colocadas muy cerca (la distancia no es suficiente como para que quepan estados ligados). En conclusión, el número de estados ligados en esta configuración se saturará y vendrá dado por el número de estados ligados máximos de la delta centrada en  $r_2$ . Este argumento se puede ver claramente en la Figura 4.7 contenida en el paper referido en [11]. En ese caso se estudiaron potenciales tipo delta en 1D pero el argumento es aplicable a 3D. Con dos cortezas esféricas puede haber  $\ell$  donde haya dos estados ligados. La gráfica sería el número de estados ligados que pueden ocurrir para un  $\ell$  dado que admita estados ligados.

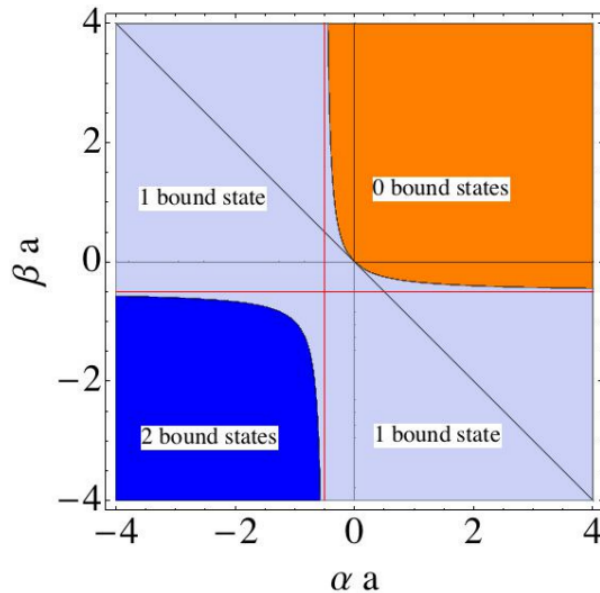


Figura 4.7: Distribución de estados ligados en el plano  $(\alpha a)$ - $(\beta a)$  siendo  $\alpha$  equivalente a la  $A$  introducida en este capítulo,  $\beta$  equivalente a  $B$  y  $a = r_2 - r_1$  la distancia entre ambas singularidades.

En la Figura 4.7 se ve que en el caso en el que los dos acoplamientos  $A$  y  $B$  de las singularidades sean positivos no hay estados ligados en el sistema. Es en esta situación en la que se puede calcular la energía de Casimir a partir de los desfases. Si los dos acoplamientos son negativos no en todos los casos hay dos estados ligados, uno por cada delta, como se podría pensar. Si ambas singularidades están muy cerca la una de la otra se elimina uno de los estados ligados porque no tiene suficiente espacio para producirse. Este tipo de comportamientos no son inusuales y se podría pensar en otros ejemplos en los que se producen estas situaciones. En el deuterón, si el estado del sistema es un triplete de spin la profundidad del pozo que representa la fuerza nuclear es suficiente como para ligar débilmente un estado y que la función de onda pueda doblarse en el interior del pozo. En cambio, si el sistema está en una configuración de singlete de spin no hay suficiente profundidad como para ligar estados. Una situación similar se produce en este caso.

En los dos casos en los que un acoplamiento sea positivo y el otro negativo, el número de estados ligados oscila entre cero y uno dependiendo de la distancia entre ambas cortezas. De todo ello se concluye que el número de estados ligados en el sistema se satura en estas configuraciones. El mismo razonamiento sería plausible en el caso contrario en el que el potencial se definiera a partir de  $A < 0$  y  $B > 0$ .

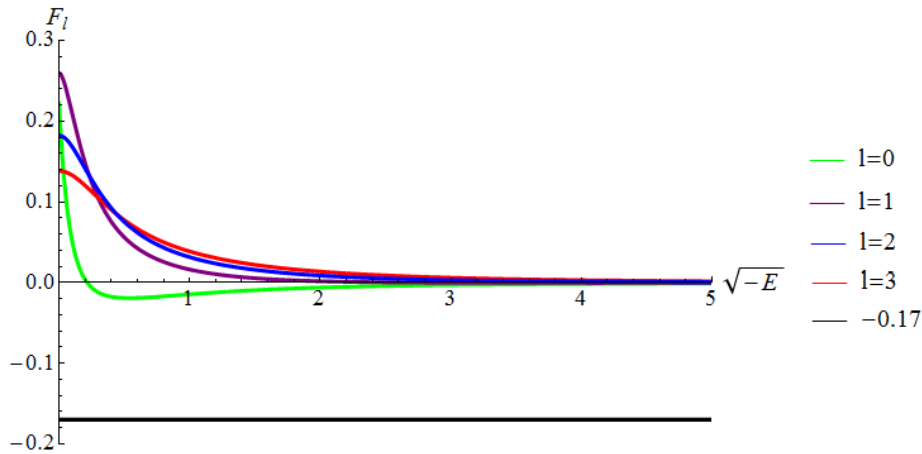


Figura 4.8: Configuración con acoplamientos de las deltas pequeños  $A = -B = -0,8$ , separadas por una distancia grande  $h = 8$  para distintos  $\ell$ . La recta negra representa el miembro derecho de la ecuación trascendente.

Si las constantes que definen a las singularidades son muy pequeñas, independientemente de la distancia entre ambas, no habrá estados ligados a pesar de que sí hay una singularidad atractiva (un pozo) capaz de ligar estados.

La configuración no lo permite. Se ve en las Figuras 4.8 y 4.9 que por construcción del sistema, la constante del miembro derecho de la ecuación trascendente es negativa y no está en el mismo rango de valores que la función que define el miembro izquierdo por lo que no hay cortes entre ambas. Y además, cuanto más pequeña es la distancia entre ambas singularidades, más se alejan las imágenes de las funciones. No caben estados ligados.

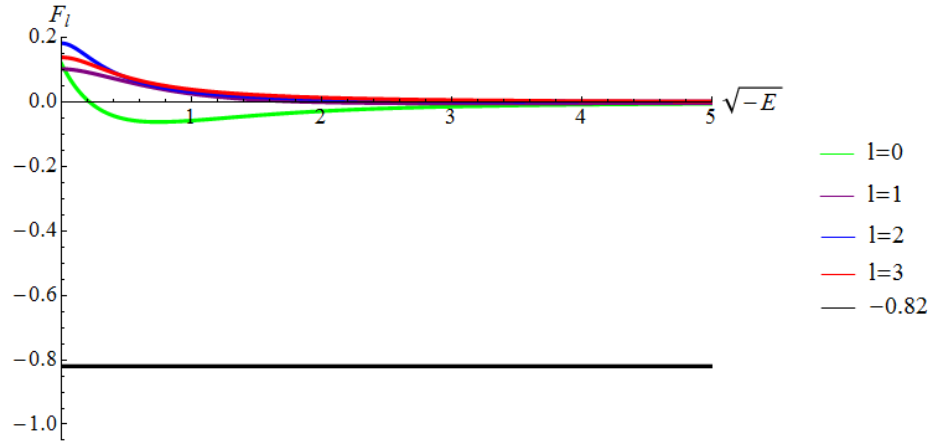


Figura 4.9: Configuración con acoplamientos de las deltas pequeños  $A = -B = -0,8$ , separadas por una distancia pequeña  $h = 0,9$  para distintos  $\ell$ .

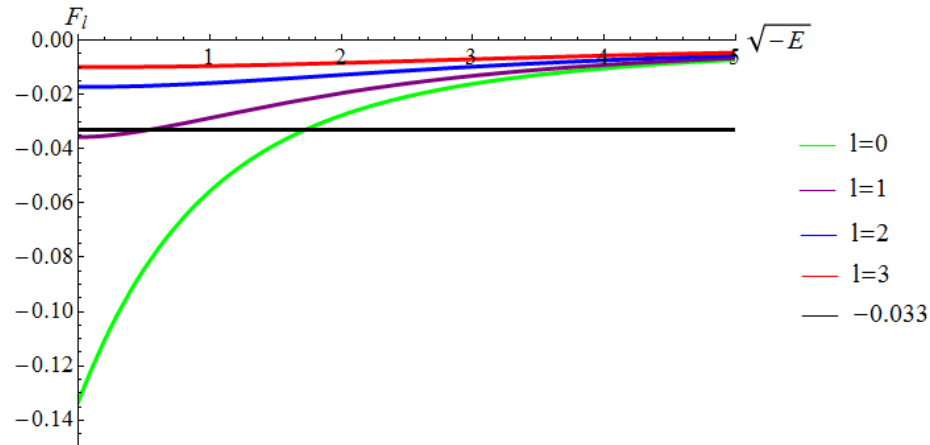


Figura 4.10: Configuración con acoplamientos de las deltas grandes  $A = -B = -5$ , separadas por una distancia pequeña  $h = 0,2$  para distintos  $\ell$ .

El caso contrario en el que las constantes de acoplamiento de las deltas son grandes (en módulo) sí produce estados ligados gracias a la presencia del pozo.



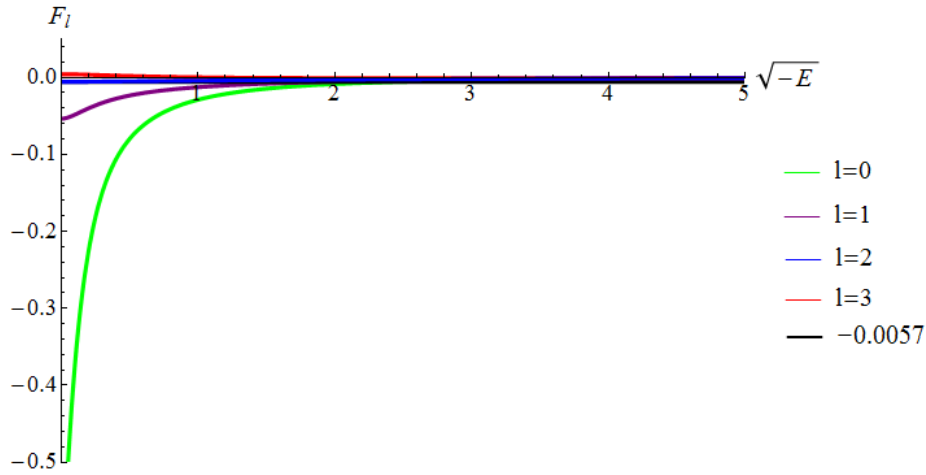


Figura 4.11: Configuración con acoplamiento de las deltas grandes  $A = -B = -5$ , separadas por una distancia grande  $h = 6$  para distintos  $\ell$ .

En la Figura 4.10 hay un total de cuatro estados ligados y, a medida que aumenta la separación entre las singularidades, el  $\ell_{max}$  también aumenta permitiendo la existencia de más estados ligados. En la Figura 4.11 aparecen cortes hasta  $\ell = 2$ , es decir, hay un total de nueve estados ligados. El rango de autovalores del hamiltoniano en el que se producen estos estados es más amplio que cuando la distancia es pequeña.

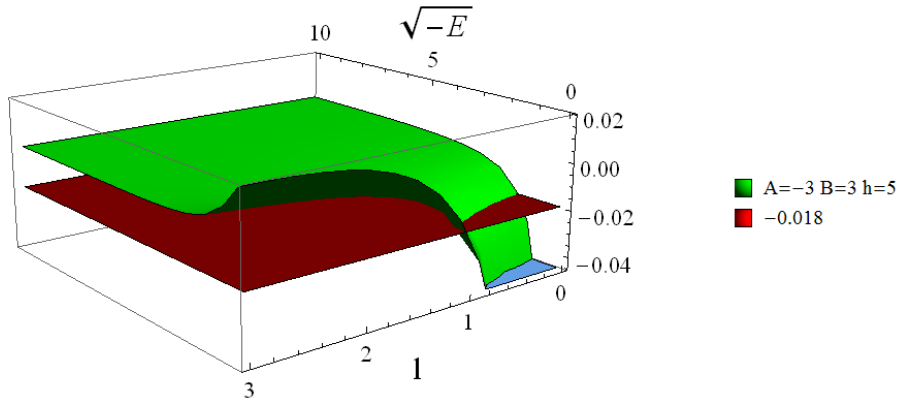


Figura 4.12: Configuración pozo-barrera con acoplamiento de las deltas grandes  $A = -B = -3$ , separadas por una distancia grande  $h = 5$  para distintos  $\ell$  en función de la energía.

Una vez presentados los resultados para el caso en el que haya dos pozos o un pozo y una barrera, se puede estudiar otro tipo de figuras en 3D.

El objetivo es ver en tres dimensiones variaciones más progresivas de los parámetros que antes se han fijado. En todas las figuras siguientes la superficie roja corresponde al miembro derecho de la ecuación trascendente para dos singularidades y la superficie verde, que es el miembro izquierdo de esa ecuación trascendente, es la situación bajo estudio.

En las Figuras 4.12 y 4.13 se puede comprobar cómo en el caso de que los acoplamientos de las deltas y la distancia sean iguales, en el caso pozo barrera sólo hay un estado ligado posible mientras que para dos pozos, valores bajos del momento angular proporcionan dos estados ligados ( $\ell = 0$ ). Hay que tener cuidado porque aunque se haya representado, por motivos gráficos, un continuo de momentos angulares solo están permitidos por definición los números naturales.

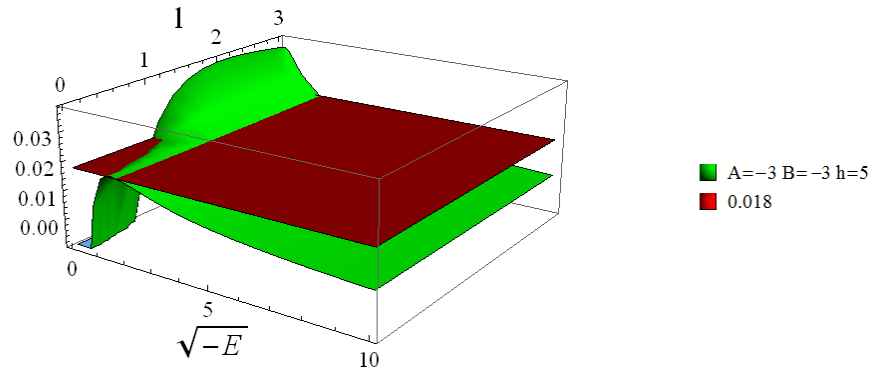


Figura 4.13: Configuración pozo-pozo con acoplamientos de las deltas grandes  $A = B = -3$ , separadas por una distancia grande  $h = 5$  para distintos  $\ell$  en función de la energía.

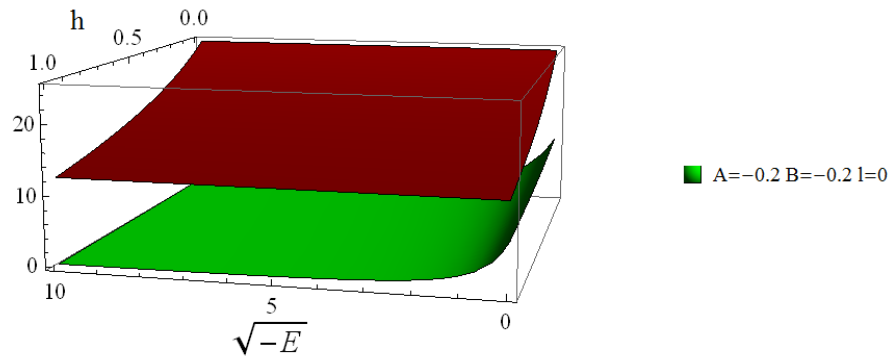


Figura 4.14: Configuración pozo-pozo con acoplamientos de las deltas pequeños  $A = -B = -0,2$ , separadas por una distancia variable pequeña  $h$  para  $\ell = 0$ .

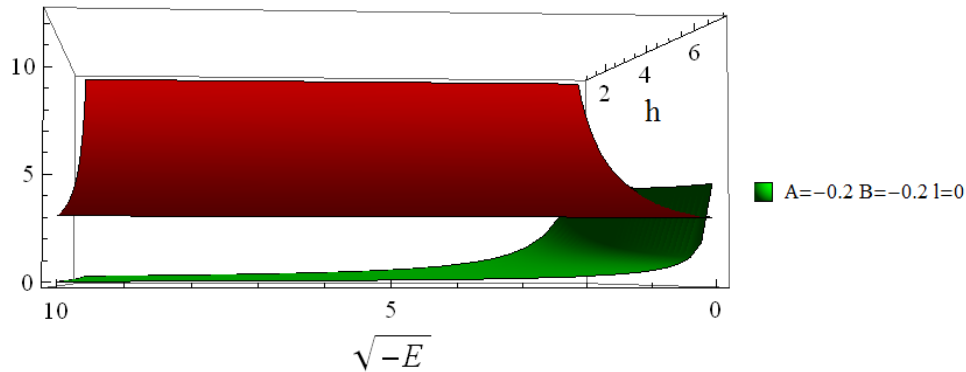


Figura 4.15: Configuración pozo-pozo con acoplamiento de los deltas pequeños  $A = -B = -0,2$ , separadas por una distancia variable grande  $h$  para  $\ell = 0$ .

En las Figuras 4.14 y 4.15 se ve cómo para la misma configuración de dos pozos pequeños, a medida que aumenta la distancia entre ellos se puede ligar algún estado para valores pequeños de la energía (se considera el caso  $\ell = 0$ ).

En las Figuras 4.16 y 4.17 se ve cómo para el mismo sistema pozo barrera pequeños en ningún caso la distancia es suficiente como para ligar algún estado a pesar de la existencia de un pozo. Pero sin embargo, si los acoplamientos son grandes, independientemente de la distancia entre las mismas (Figuras 4.18 y 4.19), hay un corte entre ambas superficies. Se crean estados ligados.

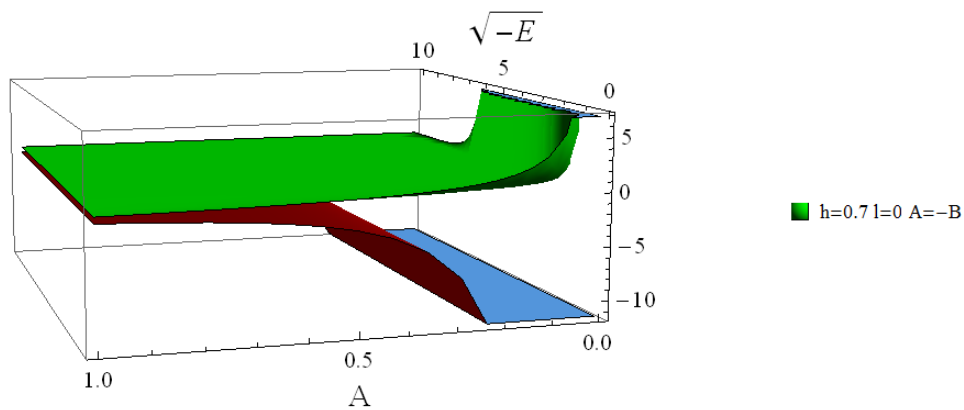


Figura 4.16: Configuración pozo-barrera con acoplamiento de los deltas variables pequeños  $A = -B$ , separadas por una distancia pequeña  $h = 0,7$  para  $\ell = 0$ .

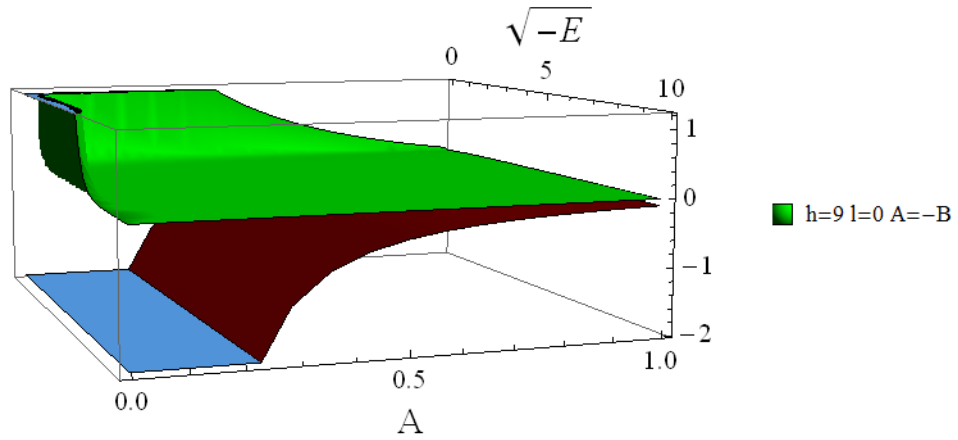


Figura 4.17: Configuración pozo-barrera con acoplamiento de las deltas variables pequeños  $A = -B$ , separadas por una distancia grande  $h = 9$  para  $\ell = 0$ .

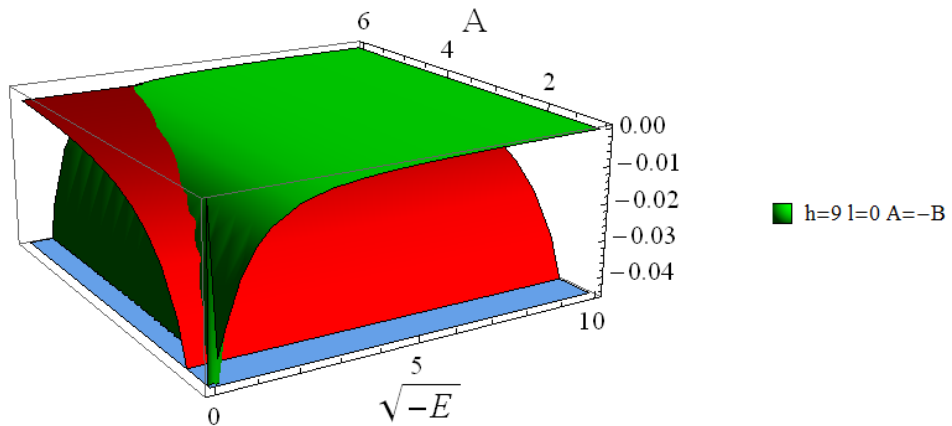


Figura 4.18: Configuración pozo-barrera con acoplamiento de las deltas variables grandes  $A = -B$ , separadas por una distancia grande  $h = 9$  para  $\ell = 0$ .

Si se observa la Figura 4.18 se ve que para cada valor del acoplamiento, y tomando  $\ell = 0$  (recuérdese que el miembro izquierdo de la ecuación trascendente en el fondo depende de cinco variables:  $A, B, h, E, \ell$  por lo que para poder representarlo en tres dimensiones hay que fijar dos grados de libertad) hay un único corte, como es lógico porque sólo hay un pozo capaz de ligar estados. Y la misma situación se reproduce en la Figura 4.19.

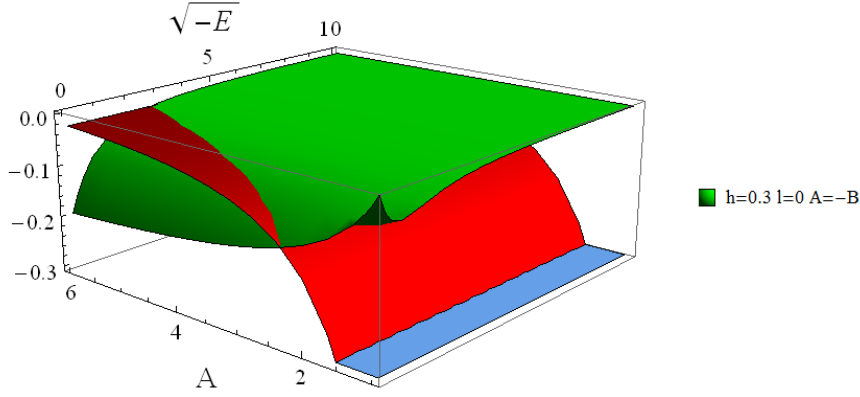


Figura 4.19: Configuración pozo-barrera con acoplamientos de las deltas variables grandes  $A = -B$ , separadas por una distancia pequeña  $h = 0,3$  para  $\ell = 0$ .

## 4.2. Cálculo de estados de scattering

En todos los potenciales anteriores se pueden calcular estados de scattering que dan la parte continua positiva del espectro de los autovalores del hamiltoniano. Sin embargo, en este apartado se va a tratar el caso en el que ambas singularidades definan potenciales repulsivos dado el interés en sus aplicaciones, concretamente en el cálculo de la energía de interacción de Casimir entre ambas cortezas esféricas en función de la distancia entre sus radios. Este estudio constituye una nueva línea de investigación en la que se va a seguir trabajando los próximos meses.

### 4.2.1. Potencial con $A > 0$ y $B > 0$

La solución general teniendo en cuenta los resultados encontrados en (4.2) y (4.3) es:

$$R(r) = \frac{1}{N}(r\sqrt{E})^{-\frac{1}{2}} \begin{cases} J_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}), & \text{si } 0 < r < r_1 \\ C_1 J_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}) + C_2 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}), & \text{si } r_1 < r < r_2 \\ C_3 J_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}) + C_4 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(r\sqrt{E}), & \text{si } r > r_2 \end{cases} \quad (4.15)$$

siendo  $N$  una constante de normalización. Aplicando las condiciones de continuidad y discontinuidad en los puntos  $r_1$  y  $r_2$  se llega a las siguientes expresiones:

$$C_1 J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) + C_2 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) = -J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1), \quad (4.16)$$

$$C_1 J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) + C_2 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) - C_3 J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) - C_4 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) = 0, \quad (4.17)$$

$$C_1 \left[ \alpha_1 J'_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) + \frac{1}{2} J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) \right] + C_2 \left[ \alpha_1 Y'_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) + \frac{1}{2} Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) \right] = \\ \left[ -Ar_1 + \frac{1}{2} \right] J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) + \alpha_1 J'_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1), \quad (4.18)$$

$$C_1 \left[ \alpha_2 J_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) - (1+\ell) J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \right] + C_2 \left[ \alpha_2 Y_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) - (1+\ell) Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \right] \\ + C_3 \left[ -\alpha_2 J_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) + (1+\ell+Br_2) J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \right] \\ + C_4 \left[ -\alpha_2 Y_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) + (1+\ell+Br_2) Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \right] = 0 \quad (4.19)$$

En este apartado se va a usar el mismo procedimiento que se realizó en el *Capítulo 3*. De las dos ecuaciones de continuidad se pueden despejar los coeficientes  $C_1$  y  $C_2$  en función de  $C_3$ ,  $C_4$  y las funciones de Bessel modificadas. Al sustituirlos en las dos condiciones de discontinuidad de la derivada primera se puede obtener la expresión de los dos coeficientes  $C_3$  y  $C_4$  restantes. Y finalmente evaluando el cociente  $-C_4/C_3$  como se hizo en el caso de una singularidad se pueden calcular los desfases del sistema como:

$$\tan \delta_\ell(k) = \frac{Q_\ell}{P_\ell}, \quad (4.20)$$

siendo

$$Q_\ell = A J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1)^2 \left[ J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \left( B Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) - k Y_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) \right) + k J_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \right] \\ - B J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2)^2 \left( k Y_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_1) + A Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) \right) \\ + B k J_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_1) Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2)^2 \\ P_\ell = -J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) \left( k Y_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_1) + A Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) \right) \left[ J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \left( k Y_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) \right. \right. \\ \left. \left. + B Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \right) - k J_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \right] + k J_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_1) Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1) \\ \left[ J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \left( k Y_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) + B Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \right) - k J_{\ell+\frac{3}{2}}(\alpha_2) Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2) \right] \\ + A B J_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_1)^2 Y_{\ell+\frac{1}{2}}(\alpha_2)^2 \quad (4.21)$$

# Capítulo 5

## Efecto Casimir en QFT

Una de las aplicaciones de interés del potencial trabajado hasta ahora es el estudio de la fuerza de Casimir entre dos cortezas esféricas representadas por potenciales delta en 3D.

En [1] se presenta un método para calcular correcciones de las divergencias en teoría cuántica de campos renormalizables. Ya que un campo puede considerarse como un conjunto de osciladores cuánticos no relativistas desacoplados (cuantizaciones del campo de Klein-Gordon o de Dirac), la energía de Casimir en el estado vacío presentará divergencias (ya que es la suma a todas las frecuencias del término  $\hbar\omega$ ). El objetivo es eliminar esas divergencias transformando la suma de Casimir sobre los modos en una suma sobre los estados ligados más una integral sobre los estados de scattering del sistema. La densidad de estados que da los pesos en esa integral se podrá expresar en función de los desfases (de ahí la importancia de los cálculos realizados en el *Capítulo 5*). Usando las distintas aproximaciones en las fórmulas de los desfases que aparecerán en las secciones de este capítulo, se podrán eliminar las divergencias.

Si se consigue comparar la energía del estado vacío de los campos en ausencia de ningún baño clásico de potenciales con la energía de punto cero de dos objetos situados en ese mismo espacio y se calculan los desfases mediante la teoría de Schrödinger no relativista se podrá extraer la contribución finita, que dependerá de las distancias entre los objetos.

## 5.1. Efecto Casimir

El vacío cuántico tiene fluctuaciones de energía que actúan sobre los objetos. Por ejemplo, dos placas conductoras paralelas se atraen debido a la diferencia de presión causada por esas fluctuaciones en ambas caras.

Al calcular teóricamente esa fuerza aparecen infinitos que, bajo un proceso de renormalización, se convierten en magnitudes finitas medidas en experimentos. Las fluctuaciones sobre el estado de mínima energía del sistema cuántico deben entenderse dentro del contexto marcado por el principio de incertidumbre de Heisenberg. Por ejemplo, en un oscilador clásico, a igualdad de frecuencia de oscilación, mayor energía implica mayor amplitud de las oscilaciones pero para su análogo cuántico significa un aumento de los cuantos de energía (que son proporcionales a la frecuencia). Para el estado de energía mínima se cumple  $E = \frac{\hbar\omega}{2}$ . En el caso de que el oscilador además esté confinado a una determinada región sólo algunas frecuencias serán permitidas. Sin embargo, si ahora se calcula la energía del punto cero del sistema hay que sumar las energías de cada una de esas frecuencias permitidas dentro del espacio que confine al oscilador en su estado de mínima energía. Es decir,  $E = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \frac{3}{2} + \frac{5}{2} + \dots \right)$ . Está claro que es una serie infinita que da lugar a una divergencia. Por ello es necesario renormalizar esas expresiones.

En cada punto del espacio vacío el campo se puede entender como una superposición de osciladores armónicos desacoplados con distintas frecuencias y energías. Los cuantos de energía son los fotones. Así, los materiales cargados interactúan porque intercambian fotones. Si se tienen dos placas confinadas en una cavidad, el campo sufrirá múltiples reflexiones y las frecuencias permitidas serán aquellas que verifiquen que la distancia entre placas es un número entero de veces media longitud de onda (las placas deben ser los nodos). Algunas longitudes de onda (por ende, algunas fluctuaciones del vacío) son reforzadas y otras atenuadas y la presión de radiación sobre las placas será distinta en función de ellas. La energía del estado vacío presentará un infinito. Si no tuviera sentido físico se podría establecer que el origen de energías del sistema fuera ese estado vacío y se eliminaría la divergencia pero no se puede hacer porque esos infinitos tienen consecuencias físicas como el efecto Casimir.

Hendrik Casimir publicó en 1948 el artículo titulado “*Sobre la atracción de dos placas perfectamente conductoras*” en la asociación de la Real Academia Holandesa de Artes y Ciencias. Estaba estudiando la estabilidad de las suspensiones coloidales de las películas depositadas sobre los tubos de rayos catódicos cuando Overbeek y Verwey, en el mismo laboratorio, vieron experimentalmente que la estabilidad de las suspensiones de polvo de cuarzo presentaban incongruencias.



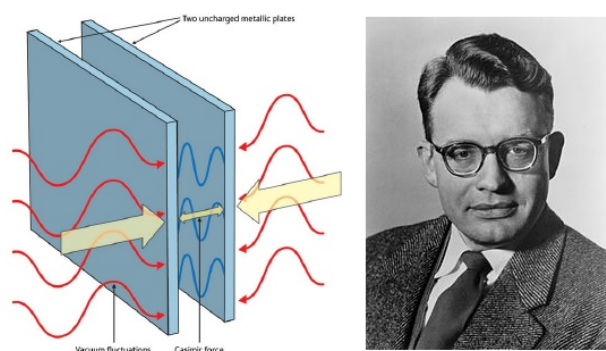


Figura 5.1: Fuerza atractiva entre placas. Hendrik Casimir.

La interacción entre partículas debía decaer como  $r^{-7}$  con la distancia pero en las fuerzas entre moléculas propuestas por Van der Waals lo hacían como  $r^{-6}$ . Puede explicarse si se consideran fuerzas retardadas debido a que la velocidad de la luz es finita. Para verlo, comparó la energía de las fluctuaciones del espacio vacío y la de las fluctuaciones del vacío esta vez en presencia de condiciones de contorno. Lo importante es que, independientemente de donde se coloque el origen de energías, la diferencia entre ambos casos da un valor finito. El campo ejerce siempre una presión de radiación proporcional a la energía o frecuencia de los modos. Por ello, si se colocan dos placas paralelas en una cavidad en resonancia, la presión en la zona entre ambas será mayor que fuera y se separarán. Pero cuando los modos no son resonantes se invierte la situación y se acercan. Al final, ambas contribuciones se superponen de manera que la resultante es una fuerza atractiva. La fuerza Casimir por unidad de área en el caso de dos placas ideales, conductoras perfectas y de extensión infinita situadas en el vacío tiene la expresión en función de la distancia ente los objetos:

$$F_C = -\frac{\hbar c \pi^2}{240 d^4}. \quad (5.1)$$

Si se logra acercar los objetos bajo estudio a escala nanométrica los efectos de la fuerza son mayores. En realidad, el resultado es muy sensible a que las placas estén perfectamente paralelas, no tengan irregularidades, se consideren las temperaturas a las que se realiza el experimento (las fluctuaciones térmicas pueden enmascarar los efectos de Casimir), la transparencia de los espejos reales para frecuencias altas, etc.

Las primeras medidas que se hicieron del experimento tenían un error accidental en el proceso experimental de cerca del 100 %. No fue hasta 1997 cuando Lamoreaux (Universidad de Washington, Seattle) midió la fuerza que aparecía entre una lente esférica y una placa de cuarzo óptico recubiertas de

oro conectadas a un péndulo de torsión con una precisión del 5%. Actualmente este tipo de experimentos se realizan con ayuda de microscopios de fuerza atómica.

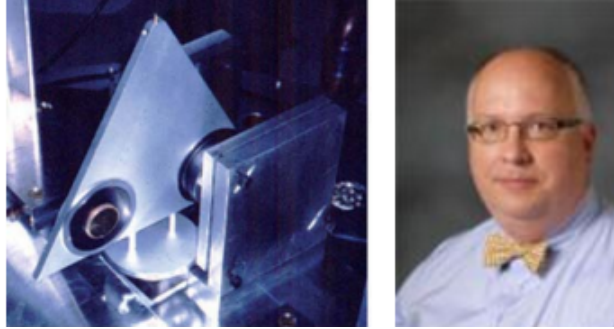


Figura 5.2: Experimento de Lamoreaux.

Si se considera un campo escalar entre dos placas con la condición de contorno de que el campo se anule en la superficie de la placa y se calcula la diferencia de la energía del punto cero con placas y en la misma región pero sin placas se puede obtener la perturbación creada por esa condición de contorno. Para lograr ese campo nulo es necesario que haya otro campo sobre la superficie que aniquile los modos infinitos del original. El problema que plantea Jaffe es que sólo se pueden anular un número finito de frecuencias. Además al introducir ese nuevo campo en la superficie se perturba el vacío correspondiente al campo escalar original. Por ello, como se verá en las siguientes secciones, es imprescindible renormalizar los cálculos.

## 5.2. Cuantización del campo

El campo de Klein-Gordon libre para partículas bosónicas se puede cuantizar canónicamente<sup>1</sup> para obtener un sistema de osciladores armónicos independientes. Sean  $\Phi(t, x)$  las coordenadas generalizadas de los campos y  $\Pi(t, x)$  los momentos conjugados. Un campo escalar es una solución de la ecuación de Klein-Gordon cuyo funcional de acción es

$$S(\phi) = \int d^{D+1}x \left( \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - U(\phi) \right), \quad (5.2)$$

<sup>1</sup>En teorías gauge es útil emplear alternativamente el *formalismo de integrales de camino*.

siendo  $U(\phi)$  un potencial de autointeracción del campo consigo mismo de tal manera que las ecuaciones de campo son  $\partial^2\phi = -U'(\phi)$ . Si se tiene una solución clásica de las mismas,  $\phi_0$ , y se consideran fluctuaciones  $\eta$  en su entorno se tiene  $\phi = \phi_0 + \eta$  y se puede desarrollar la acción  $S(\phi_0 + \eta)$  hasta segundo orden en las fluctuaciones hasta llegar a:

$$S(\phi_0 + \eta) = S(\phi_0) + \frac{1}{2} \int d^{D+1}x [(\partial\eta)^2 + U''(\phi_0)\eta^2] + o(\eta^3), \quad (5.3)$$

donde  $S(\phi_0)$  es un número independiente de  $\eta$  y no es relevante en el estudio de la dinámica de las pequeñas fluctuaciones. Las ecuaciones del campo correspondientes serán  $-\partial^2\eta + U''(\phi_0)\eta = 0$ . Tomando  $\eta_{\mu\nu} = (- + + +)$  las ecuaciones anteriores derivan a:

$$-\partial_0^2\eta = \hat{K}(\eta), \quad \hat{K} = -\Delta + V_{\phi_0}(x), \quad V_{\phi_0}(x) = U''(\phi_0), \quad (5.4)$$

donde  $\hat{K}$  es el operador de Schrödinger. De esta forma se pueden tratar las fluctuaciones como un campo cuántico escalar y expresarlas de la forma:

$$\eta(x) = \sum_{\lambda_k} \int a_k \left[ e^{i\sqrt{\lambda_k}t} f_\lambda(\vec{x}) + e^{-i\sqrt{\lambda_k}t} f_\lambda^*(\vec{x}) \right], \quad (5.5)$$

donde se suma sobre el espectro  $\lambda_k$  del operador de Schrödinger y se puede aplicar la segunda cuantización para promover coeficientes a operadores para llegar a las expresiones de un conjunto de osciladores siendo su frecuencia  $w_k = \sqrt{\lambda_k}$ .

Usando la imagen de Heisenberg imponiendo las reglas de conmutación para los operadores a tiempos iguales se llega a:

$$[\Phi(t, x), \Pi(t, y)] = i\delta^3(x - y), \quad [\Phi(t, x), \Phi(t, y)] = [\Pi(t, x), \Pi(t, y)] = 0. \quad (5.6)$$

Un campo escalar real viene descrito en función de los operadores aniquilación y creación  $a, a^+$  como

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 \sqrt{2E_p}} (a_p e^{-ipx} + a_p^+ e^{ipx}), \\ \Pi(t, y) &= \partial_t \Phi = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left( -i\sqrt{\frac{E_q}{2}} \right) (a_q e^{-iqy} - a_q^+ e^{iqy}). \end{aligned} \quad (5.7)$$

donde  $E_p = \sqrt{m^2 + p^2}$ . Sustituyendo estas expresiones en los conmutadores (5.6) se obtienen las relaciones de conmutación de los operadores creación y aniquilación propios de un oscilador:

$$[a_p, a_q^\dagger] = (2\pi)^3 \delta^3(p - q), \quad [a_p, a_q] = [a_p^\dagger, a_q^\dagger] = 0. \quad (5.8)$$

Con ello se obtiene una colección infinita de osciladores armónicos (uno para cada valor posible<sup>2</sup> de  $p = \omega$ ), con el hamiltoniano típico  $H = \hbar\omega_p(a_p^+ a_p + \frac{1}{2})$  donde  $N_p = a_p^+ a_p$  es el operador número de modos. El estado vacío se define por  $a_p|0\rangle = 0 \quad \forall p$  y cualquier otro estado multipartícula<sup>3</sup> se puede construir como una combinación lineal a partir de este:

$$(a_{p_1}^+)^{n_1} (a_{p_2}^+)^{n_2} \dots |0\rangle. \quad (5.9)$$

Los autoestados del hamiltoniano forman el espacio de Hilbert del sistema (*espacio de Fock*). Si se emplea el orden normal en los operadores (operadores creación a la izquierda de los de aniquilación) se obtienen las siguientes relaciones para el hamiltoniano cuántico del sistema y el momento:

$$H = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} E_p \left( N_p + \frac{1}{2} \right), \quad P^i = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} p^i a_p^+ a_p, \quad (5.10)$$

donde  $E_p = \hbar\omega_p$ . En la expresión de la energía hay que tener en cuenta la energía del punto cero ( $\langle 0|H|0\rangle = \sum_p \frac{1}{2} E_p$ ). Y en la relación correspondiente al momento los dos primeros sumandos no contribuyen porque la integral de una función impar en un intervalo simétrico es nula. La energía y momento de los estados multipartícula se pueden escribir de este modo como:

$$\begin{aligned} H |p_1 p_2 \dots\rangle &= (E_{p_1} + E_{p_2} + \dots) |p_1 p_2 \dots\rangle, \\ P^i |p_1 p_2 \dots\rangle &= (p_1^i + p_2^i + \dots) |p_1 p_2 \dots\rangle. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Como se trata de campos escalares de spin cero, por el teorema de Noether se ve que los cuantos que crea y destruye el campo son partículas de spin cero. De ahí que ese establezca la conexión *spin-estadística* donde las partículas de spin cero obedecen la estadística de Bose-Einstein. En QFT esta conexión surge de manera directa, no como postulado. Para los campos de spin 1/2 se emplean relaciones de anticonmutación que llevan a estados multipartícula antisimétricos, según indica la estadística de Fermi-Dirac.

Para los campos complejos se establecen definiciones similares:

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 \sqrt{2E_p}} (a_p e^{-ipx} + b_p^+ e^{ipx}), \\ \Phi^\dagger(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 \sqrt{2E_p}} (a_p^+ e^{ipx} + b_p e^{-ipx}). \end{aligned} \quad (5.12)$$

<sup>2</sup>Nótese que en QFT,  $p = k = \omega$  mientras que en la mecánica cuántica no relativista para la notación empleada en este trabajo  $E = k^2$ .

<sup>3</sup>Estos estados son simétricos al intercambio de partículas porque los operadores creación conmutan entre sí.

De esta manera, los conmutadores (5.6) dan lugar a los análogos para los operadores creación y aniquilación:

$$[a_p, a_q^+] = [b_p, b_q^+] = (2\pi)^3 \delta^3(p - q), \quad [a_p, a_q] = [b_p, b_q] = [a_p, b_q^+] = 0. \quad (5.13)$$

El *espacio de Fock* se construye de manera análoga al escalar real mediante  $a_p | 0 \rangle = b_p | 0 \rangle = 0$  y aplicando los operadores creación adecuadamente a partir del estado vacío. Aplicando el orden normal se obtienen las siguientes relaciones importantes para la energía, los momentos y la carga conservada:

$$\begin{aligned} H &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} E_p (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p + 1), \\ P^i &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} p^i (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p), \\ Q &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} (a_p^+ a_p - b_p^+ b_p). \end{aligned} \quad (5.14)$$

Esto quiere decir que  $a_p^+ | 0 \rangle$  representa un estado con carga  $+1$  y  $b_p^+ | 0 \rangle$  con carga  $-1$ . Se ve que en este caso a los campos complejos se les asocia el doble de energía que en el caso anterior de campos escalares reales. Los operadores correspondientes a soluciones que tienen energías positivas en este formalismo complejo son operadores que aniquilan las partículas de carga unidad y los operadores que van con las soluciones de energía negativa son los que crean las antipartículas. Esto no ocurría en los campos escalares reales porque  $a_p = b_p$  y el mismo operador crea y destruye partículas que coinciden con sus correspondientes antipartículas.

## 5.3. Energía de Casimir en un cuerpo

### 5.3.1. Desfasajes y coeficientes del núcleo de calor

La energía de Casimir del campo (como conjunto infinito de osciladores) se evalúa como la suma a todos los modos posibles de la energía del estado fundamental de cada oscilador armónico en cada modo. Formalmente la energía del vacío es una serie divergente. Para sustraer las partes finitas y físicamente significativas se debe regularizar dicha expresión divergente. Uno de los métodos de regularización más extendidos hace uso de las funciones Zeta (no necesariamente de Riemann).

La energía de Casimir de un campo escalar de masa  $m$  que obedece la ecuación de Klein-Gordon se puede expresar en función de la función zeta:

$$E_C(s) = \frac{1}{2} \zeta \left( s - \frac{1}{2} \right) \mu^{2s} \Big|_{s=0} \quad \text{con} \quad \zeta(s) = \sum_j (\lambda_j^2 + m^2)^{-s}. \quad (5.15)$$

donde  $s$  es un parámetro de regularización y  $\mu$  es un parámetro de masa. Por otra parte, los  $\lambda_j$  de la expresión anterior son los autovalores de la ecuación de Schrödinger  $[-\nabla + V(r)] \psi_j = \lambda_j^2 \psi_j$  para un campo escalar masivo en un potencial de fondo esféricamente simétrico en  $\mathbb{R}^3$ .

La utilidad de este cambio es que la función zeta definida en la región  $\{s \in \mathbb{C} \mid \text{Re}(s) > 1\}$  converge y define una función que es analítica. Pero puede extenderse analíticamente de manera única a una función meromorfa en todo el plano complejo con polos en  $s = 1/2 - n; n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ . De esta manera, se puede trabajar con ella en la región en la que es analítica, donde la serie converge y ese resultado extenderlo a todo el plano complejo y así evitar las divergencias.

Cuando la masa del campo tiende a infinito las fluctuaciones del mismo deben anularse (no se pueden crear pares de partículas sin violar el principio de incertidumbre). La expresión de la energía es siempre divergente por lo que hay que extraer esas divergencias usando la fórmula de regularización (5.15). Hay que encontrar una representación de la función zeta válida en  $s = -1/2$ .

La ecuación de Schrödinger radial se puede resolver y expresar en términos de las funciones de Jost<sup>4</sup>, que es una forma análoga a la representación de scattering ya que los desfasajes y las funciones de Jost contienen la misma información (la matriz de scattering). En la zona asintótica (límite de  $r$  tendiendo a infinito) el comportamiento de las soluciones de la ecuaciones de Schrödinger se expresan como productos de funciones de Jost  $f_\ell(k)$  y funciones de Hankel-Ricatti  $h_\ell(k)$  de la siguiente manera

$$\psi_j(r) \sim \frac{i}{2} [f_\ell(k) h_\ell^-(kr) - f_\ell^*(k) h_\ell^+(kr)], \quad (5.16)$$

siendo  $k^2 = E$ . Al imponer las condiciones de contorno se llega a una ecuación trascendente que permite obtener los autovalores de la ecuación de Schrödinger para estados ligados en espacios no compactos y para todos los estados del espectro en espacios compactos con borde. No hace falta conocer el espectro o las funciones propias exactas de la ecuación para calcular los desfasajes (como en el *Capítulo 3*) porque con este procedimiento se puede obtener una

---

<sup>4</sup>Para más información ver [40].

representación de la función zeta válida no sólo en la región donde es analítica, siempre y cuando el problema a resolver tenga la suficiente geometría. Basta con conocer el comportamiento asintótico de las funciones de Jost.

Las funciones de Jost se relacionan con los desfases<sup>5</sup> de manera que, suponiendo que no haya estados ligados, la función zeta espectral asociada al operador de Schrödinger que genera las torres de estados de una partícula (osciladores) y que es  $\sum_{\lambda_n} (\lambda_n^{-s})$  donde  $\lambda_n \in \text{Spec}(P)$  con  $P$  el operador de Schrödinger anteriormente mencionado, viene dada por:

$$\zeta(s) = \frac{2s}{\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \int_0^{\infty} dk \frac{k}{(k^2 + m^2)^{s+1}} \delta_{\ell}(k), \quad (5.17)$$

de donde se ve que las singularidades de zeta (y por tanto, las de la energía) vendrán dadas por el comportamiento asintótico de los desfases para  $k$  grandes. Si se eliminan correctamente las divergencias operando con los desfases (a través de los coeficientes del núcleo de calor  $a_i$ ), se llega a un resultado convergente físicamente aceptable. La energía de Casimir renormalizada toma la forma:

$$E_C = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \frac{k}{\sqrt{k^2 + m^2}} \delta'(k), \quad (5.18)$$

siendo  $k$  las frecuencias reales. La expresión de los desfases que hay que usar para eliminar las divergencias es:

$$\delta'(k) = \delta(k) - \frac{4\sqrt{\pi}}{3} a_0 k^3 - \pi a_{1/2} k^2 - 2\sqrt{\pi} a_1 k - \pi a_{3/2} - \sqrt{\pi} a_2 \frac{1}{k}. \quad (5.19)$$

En la última expresión, los desfases  $\delta(k)$  se calculan sumando a todos los  $\ell$  posibles sin olvidar su multiplicidad. Es decir,

$$\delta(k) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \delta_{\ell}(k). \quad (5.20)$$

Nótese que si se considera el operador hamiltoniano  $H_0$  de la partícula libre (que involucra únicamente el laplaciano) entonces  $\text{Tr} e^{-\beta H_0}$  es la función de partición de una colectividad canónica de partículas idénticas que no interactúan con nada ni entre sí. La expansión para  $\beta$  pequeños (cuyos coeficientes son los del calor) es la expresión aproximada de la función de partición a altas temperaturas ( $\beta = 1/(kT)$ ). Rotando del eje real al imaginario (*rotación de Wick*) se ve que los coeficientes del calor permiten calcular magnitudes en QFT a primer orden en  $\hbar$  (al hacer la rotación de Wick la  $\beta$  pasa a ser interpretada como  $-i\hbar$  por lo que la expansión en  $\beta$  pequeños es la contribución cuántica más relevante).

<sup>5</sup>Desarrollo matemático en la referencia [41].

Una partícula cuántica es matemáticamente igual a una colectividad canónica de partículas clásicas cambiando  $\hbar$  por  $-1/k$  y cambiando tiempo por la temperatura  $-i/T$ . Por ello, una colectividad de partículas cuánticas debe ser una colección de colectividades de partículas clásicas, que es en sí la colectividad macrocanónica.

### 5.3.2. Cálculo de la energía

En este apartado se va a comentar la utilidad de este método para calcular la presión ejercida sobre un objeto esférico con una única singularidad al hincharse o deshincharse por efecto del campo. El potencial a estudiar es  $V(r) = A\delta(r - r_0)$  con  $A > 0$  en el que, como ya se ha estudiado anteriormente, no hay estados ligados. En el *Capítulo 3* se calcularon los desfases, llegando a la relación:

$$\delta_\ell(k) = \arctan \left[ \frac{A\pi r_0 J_{\ell+\frac{1}{2}}^2(kr_0)}{A\pi r_0 J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr_0) Y_{\ell+\frac{1}{2}}(kr_0) - 2} \right], \quad (5.21)$$

siendo  $k = \sqrt{E}$  y  $E$  la energía. En la referencia [42] se pueden encontrar las expresiones concretas de los coeficientes del núcleo del calor para un potencial con una delta. Se recogen a continuación:

$$a_0 = a_{1/2} = 0, \quad a_1 = \frac{Ar_0^2}{2\sqrt{\pi}}, \quad a_{3/2} = \frac{A^2 r_0^2}{8}, \quad a_2 = -\frac{A^3 r_0^2}{12\sqrt{\pi}}. \quad (5.22)$$

Si se sustraen las divergencias de los desfases mediante estos coeficientes y se define una función numérica que permita sumar en los números cuánticos para obtener un *grid* suficiente de valores numéricos del desfase total se puede encontrar un polinomio de interpolación que sea integrable y de esta manera se llega a la variación de la energía Casimir en función de los parámetros que definen la delta.

No obstante, estos cálculos sirven para estudiar situaciones más complicadas en QFT donde la masa  $m$  del campo considerado puede variar y ser no nula. El resultado se puede ver en [41]. Otra posible situación a estudiar es la presión que ejercen entre sí dos cortezas esféricas con singularidad tipo delta concéntricas en función de la distancia  $h$  entre ambas. En este caso no importa que los potenciales de cada singularidad no tengan estados ligados sino que sólo basta con que el potencial total expresado como la suma de las singularidades individuales no los tenga.



Como el cálculo de los desfasajes se ha realizado en el *Capítulo 4* se podrían aplicar las fórmulas descritas en el apartado anterior. Este ejemplo es una de las futuras vías de investigación en las que vamos a trabajar.

El resultado para una delta se puede consultar en la bibliografía [41]. En este capítulo se va a calcular la energía de Casimir entre dos esferas disjuntas usando las expresiones halladas de los desfasajes y aplicando el *método TGTG* [45].

## 5.4. Energía de Casimir para 2 cuerpos

### 5.4.1. Fórmula TGTG

La presencia de objetos clásicos con propiedades arbitrarias (que pueden ser descritos mediante potenciales singulares o también extensiones autoadjuntas como se puede ver en [15, 16, 53, 55, 56]) modifican el comportamiento de los campos cuánticos propiciando la aparición de efectos de borde en el vacío cuántico tales como la fuerza de Casimir. En una dimensión<sup>6</sup>, el cálculo de las mismas se basa en la teoría de scattering de la mecánica cuántica no relativista ya que el espectro de los campos escalares sin masa en una geometría abierta es continuo y requiere calcular los estados de dispersión.

En dimensiones mayores también se puede estudiar la aproximación de scattering. La parte de energía finita de vacío que depende de la distancia entre los cuerpos (la energía de Casimir) se puede expresar como el determinante del operador  $(1 - T_A G_0 T_B G_0)$  donde  $T_A, T_B$  son los operadores de Lippmann-Schwinger asociados a los dos cuerpos disjuntos  $A$  y  $B$  bajo estudio y  $G_0$  es la función de Green del campo escalar con masa libre<sup>7</sup>. Téngase en cuenta que  $T$  se relaciona con la matriz  $S$  mediante  $S = 1 - 2\pi i \delta(\omega^2 - \omega'^2) T_\omega$ . Por tanto, si se calcula la probabilidad de transición (mediante el proceso de scattering) entre un par de estados de ondas libres  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$  con igual energía resulta ser el elemento correspondiente de la matriz de transición. En este formalismo se usan las funciones de Green para calcular la densidad de estados de un operador diferencial que cuenta con un potencial de fondo.

---

<sup>6</sup>También en dimensiones  $N$  mayores se puede aplicar el mismo procedimiento aunque la matriz de scattering tendrá dimensión infinita. Ya no habrá coeficientes de reflexión por la derecha e izquierda del cuerpo porque al ser dimensiones mayores sólo se puede trabajar con desfasajes.

<sup>7</sup>En el límite no relativista la fuerza de Casimir desaparece porque no se generan pares de partículas (no hay contribuciones a la energía de vacío en forma de *loop*). En la versión relativista  $G$  es el propagador de Feynman libre.

En el cálculo de la energía (que es una suma a todos los modos posibles), la parte finita y dependiente de la distancia entre cuerpos se expresa como:

$$E_C(a) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \log[\det(1 - T_A G_{0AB} T_B G_{0BA})]. \quad (5.23)$$

Se está trabajando en el espacio Lorentziano, con frecuencias reales y empleando el propagador de Feynmann. La rotación de Wick  $T(\omega) \rightarrow T(i\omega)$  se usa para que  $T$  sea hermítico y evitar así las singularidades de los potenciales (que se encuentran para valores reales de las frecuencias). En los casos en los que sea posible resolver analíticamente la integral porque se conozca la expresión de los operadores en función de los desfases, el resultado de la integración en las frecuencias reales o complejas es el mismo y se puede emplear cualquiera de los dos procedimientos.

Se puede expandir  $G_0(x_a, x_b)$  en una base de conjuntos de ondas libres  $\{\phi_\alpha(x_a)\}, \{\phi_\beta(x_b)\}$  con energía definida mediante  $\omega$  (que son las soluciones de la ecuación homogénea de ondas libres) de la siguiente manera:

$$G_0(x_a, x_b) = \sum C_{\alpha\beta} \phi_\alpha^*(x_a) \phi_\beta(x_b). \quad (5.24)$$

De esta manera el operador  $TGTG$ , que por simplicidad se va a considerar que actúa sólo en el volumen del cuerpo  $A$ , se puede expresar como:

$$T_A G_0 T_B G_0 = \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'} T_A |\alpha\rangle C_{\alpha\beta} \langle\beta| T_B |\beta'\rangle C_{\alpha'\beta'} \langle\alpha'|, \quad (5.25)$$

y la energía de Casimir se reduce a:

$$E_C = \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \log[\det(1 - K(i\omega))], \quad (5.26)$$

con  $K = T_A G_0 T_B G_0$  (matemáticamente se puede seguir un desarrollo más completo en [16]). En general se puede restringir la matriz  $K$  a un subespacio finito (y por ello,  $K$  será una matriz de dimensión finita) correspondiente a las únicas ondas esféricas que contribuyan al scattering.

Por ejemplo, en una dimensión todos los estados con la misma energía  $E$  se pueden expresar como dos modos: las ondas planas  $e^{\pm i\omega x}$  donde  $\omega^2 = E$ . En este caso, la matriz  $K$  resulta ser el producto del coeficiente de reflexión de la onda que es dispersada por la derecha por el cuerpo  $A$  y el coeficiente de reflexión de la onda dispersada desde la izquierda por el cuerpo  $B$  cuando  $A$  está situado a la izquierda de  $B$ . En el caso de que se esté considerando un campo escalar unidimensional con una única componente estos coeficientes son números complejos. Si tiene  $n$  componentes los coeficientes de reflexión serán matrices  $n \times n$ .

En el caso de dos cuerpos en 3D resulta conveniente expresar la matriz de transición  $T$  en la base de ondas esféricas. El sistema de coordenadas usado es el siguiente:

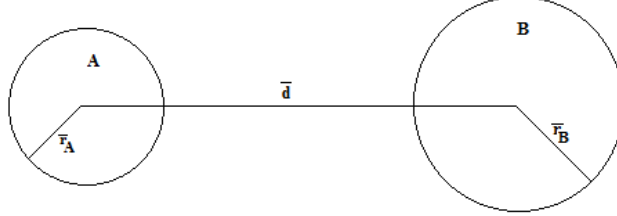


Figura 5.3: Parametrización de los potenciales. Se toman dos puntos en el interior de los cuerpos. El cuerpo A (B) se parametriza con un radiovector  $\vec{r}_A$  ( $\vec{r}_B$ ) desde el punto  $P_A$  ( $P_B$ ). El vector  $\vec{d}$  conecta ambos puntos.

Como  $A$  y  $B$  son esféricamente simétricos la matriz  $T$  es diagonal en la base del momento angular y la rotación alrededor de la dirección de la recta que las une (la distancia de separación entre ellas es  $d$ ) es una simetría del sistema. El determinante será el producto de términos para los primeros órdenes del número azimutal  $m$  (si  $m$  aumenta mucho las correcciones dejan de ser apreciables) y la energía resulta:

$$E = \sum_m \int \frac{d\omega}{2\pi} \log[\det(1 - K^{(m)}(i\omega))], \quad (5.27)$$

donde el operador  $K$  se puede escribir como

$$K_{\ell,\ell'}^{(m)} = \sum_j g_{\ell,j}^{(m)} t_j^{(A)} g_{j,\ell'}^{(m)} t_{\ell'}^{(B)} \quad (5.28)$$

siendo:

$$t_j = \frac{1}{2}(-1)^j (e^{2i\delta_j} - 1)$$

$$g_{\ell_1,\ell_2}^{(m)}(i\omega) = (-1)^{m+1} \sqrt{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sqrt{\frac{2}{\pi d\omega}} \times$$

$$\times K_{\ell+\frac{1}{2}}(d\omega) \begin{pmatrix} \ell_2 & \ell_1 & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_2 & \ell_1 & \ell \\ m & -m & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.29)$$

donde  $K_{\ell+\frac{1}{2}}$  son las funciones modificadas de Bessel de segundo orden y  $\delta_j$  son los desfases. Las matrices contenidas en la expresión anterior son las matrices  $3j$ , que están relacionadas con los coeficientes de Clebsch-Gordan.

$t_j$  y  $g_{\ell_1, \ell_2}^{(m)}$  son los elementos de matriz de los operadores de Lippmann-Schwinger (nótese que las componentes esféricas de este operador vienen dadas por los desfases) y las funciones de Green, respectivamente.

### 5.4.2. Cálculo de la energía

En este apartado se va a estudiar el caso de dos objetos esféricos disjuntos  $A$  y  $B$  separados una distancia  $d$  y representados por potenciales:

$$V_A = A \delta(r - r_0^A) \quad \text{y} \quad V_B = B \delta(r - r_0^B) \quad \text{con} \quad A, B > 0. \quad (5.30)$$

El definir los acoplamientos de las deltas positivos implica que esos potenciales no tienen estados ligados y es posible calcular la energía de Casimir. Se trata de dos singularidades separadas entre sí y no concéntricas. Eso es así porque es necesario que los soportes de los potenciales sean disjuntos para poder separar la contribución de Lippman-Schwinger de ambos y que sean aplicables las fórmulas descritas en el apartado anterior. Nótese que en ellas no hay términos cruzados  $V_A V_B$  cuando se opera con el potencial total, que sería  $(V_A + V_B)^2$ . De ahí que estén pensadas para situaciones en las que no haya solapamiento de las singularidades individuales. La fórmula  $TGTG$  se puede operar aprovechando la ortogonalidad de los símbolos  $3j$  y llegar a una fórmula más simplificada:

$$E = -\frac{ABr_1r_2}{4d} \int_0^\infty \frac{1}{x} \sum_{\ell \ell' \ell''} (2\ell + 1)(2\ell' + 1)(2\ell'' + 1) \begin{pmatrix} \ell & \ell' & \ell'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 Q dx, \quad (5.31)$$

$$Q = K_{\ell'' + \frac{1}{2}}^2(x) I_{\ell + \frac{1}{2}}^2\left(\frac{xr_1}{d}\right) I_{\ell' + \frac{1}{2}}^2\left(\frac{xr_2}{d}\right).$$

También debe quedar claro que las fórmulas son válidas cuando los acoplamientos de las singularidades delta de Dirac son débiles<sup>8</sup> (nótese que se está trabajando además con dos objetos semitransparentes ya que los coeficientes  $A, B$  son finitos). Esta característica hace que sea posible hacer una expansión en series del integrando en función de los radios normalizados a la distancia  $r_i/d$  y sumarlo para obtener una forma cerrada más manejable de la energía de Casimir:

$$E = \frac{ABr_1r_2}{16\pi d} \ln \left| \frac{1 - \left(\frac{r_1}{d} + \frac{r_2}{d}\right)^2}{1 - \left(\frac{r_1}{d} - \frac{r_2}{d}\right)^2} \right|. \quad (5.32)$$

<sup>8</sup>Para interacciones fuertes hay que seguir otro procedimiento que en caso de interés se puede consultar en [43] para esferas de Dirichlet o en [44] para condiciones de Robin.

En las Figuras 5.4 y 5.5 aparecen representaciones de la energía de Casimir en función de los radios de las esferas normalizados a la distancia entre sus centros. En ambas se evalúa la función

$$g\left(\frac{r_1}{d} - \frac{r_2}{d}\right) = -\frac{r_1 r_2}{d^2} \ln \left| \frac{1 - \left(\frac{r_1}{d} + \frac{r_2}{d}\right)^2}{1 - \left(\frac{r_1}{d} - \frac{r_2}{d}\right)^2} \right| \quad (5.33)$$

por lo que para calcular la energía hay que multiplicarlo por una constante  $ABd/16\pi$  positiva por construcción de los potenciales (por lo que no cambia el signo de los resultados de las gráficas) que involucra las constantes de interacción de las deltas y la distancia entre ellas.

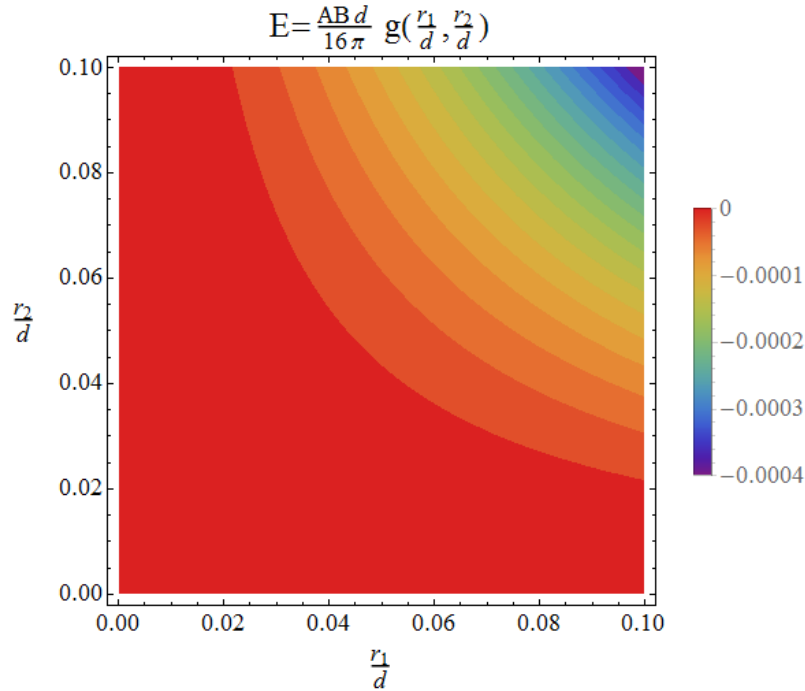


Figura 5.4: Energía de Casimir para dos esferas singulares no concéntricas en función de la distancia  $d$  entre ellas en un intervalo  $0 \leq r_1, r_2 \leq 0,1d$ .

Como se puede observar en la Figura 5.4 la energía es siempre negativa, es decir, atractiva. Aquí se ha elegido una configuración del sistema en la que los radios de las singularidades esféricas son muy pequeños en comparación con la distancia entre ambos por lo que los cuerpos están muy separados entre sí. Cada uno de los colores representa las distintas configuraciones físicas de las deltas para las que se obtiene el mismo valor de la energía de Casimir. Los números exactos se pueden obtener a partir de la leyenda de colores adjuntada.

A partir de estos valores numéricos se puede ampliar el estudio a una configuración particular de los acoplamientos o intensidades de los potenciales sin más que multiplicar el valor por la constante definida por  $ABd/16\pi$ . También se observa que cuando las esferas están muy separadas los valores de las energías son muy pequeños en magnitud. Era el resultado esperado ya que en las fórmulas se ve como la energía es inversamente proporcional a la distancia entre las singularidades. Conforme el radio va aumentando (desde la situación ideal en la que las singularidades son puntuales) se ve como la figura adquiere tonos azulados correspondientes a mayores valores (en módulo) de la energía de interacción porque las singularidades de ambos cuerpos se acercan.

La otra situación extrema que se puede comentar es el caso en el que las esferas singulares tengan radios muy amplios de manera que estén muy próximas entre sí, llegando incluso a tocarse siempre y cuando no se solapen. Los resultados se incluyen en la Figura 5.5. También se obtienen energías negativas pero ahora su magnitud es tres órdenes de magnitud mayor que en el caso anterior.

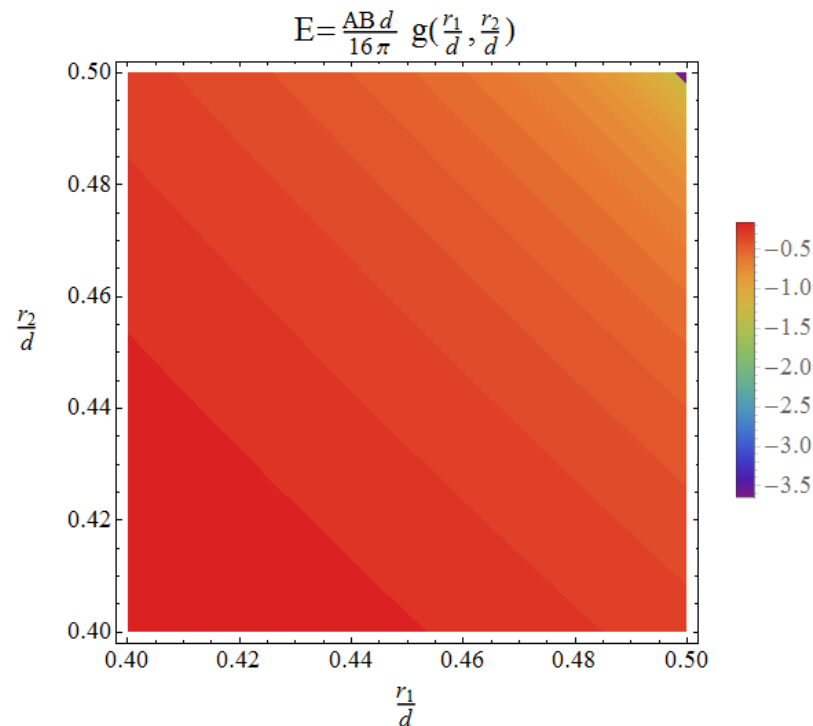


Figura 5.5: Energía de Casimir para dos esferas singulares no concéntricas en función de la distancia  $d$  entre ellas en un intervalo  $0,4d \leq r_1, r_2 \leq 0,5d$ .

Se ve que a medida que se aproximan, la magnitud de la energía aumenta debido a esa relación de proporcionalidad inversa entre la energía y la distancia. Esto está de acuerdo con el hecho de que a escalas nanométricas se miden experimentalmente fuerzas de Casimir importantes entre los objetos. Por ejemplo, en nanotecnología es fundamental tener en cuenta estas predicciones porque los componentes electrónicos de los circuitos podrían atraerse a estas escalas y juntarse de manera que los dispositivos se desviarían del comportamiento para el que están diseñados.

Un detalle que puede resultar confuso y es preciso comentar es que a pesar de que ambas gráficas tengan el mismo color rojo no es el mismo valor numérico porque las configuraciones han cambiado. Se pasa de una situación en la que los dos cuerpos están muy separados entre sí al caso contrario. Es preciso tenerlo en cuenta para evitar posibles desavenencias.

Finalmente, se puede calcular la fuerza que ejerce una esfera sobre la otra si se deriva la expresión (5.32) respecto a la distancia y se cambia de signo. Se obtiene en este caso:

$$F = -\frac{ABr_1r_2}{16\pi} \left[ \frac{8r_1r_2}{(r_1 - r_2 - d)(r_1 + r_2 - d)(r_1 - r_2 + d)(r_1 + r_2 + d)} - \frac{1}{d^2} \ln \left| \frac{(r_1 - r_2 - d)(r_1 + r_2 + d)}{(r_1 - r_2)^2 - d^2} \right| \right]. \quad (5.34)$$

En conclusión, cuando se estudian potenciales con dos deltas (permite describir planos parcialmente transparentes) se ve que la fuerza de Casimir es atractiva o repulsiva en función de que los acoplamientos de las deltas tengan el mismo o diferente signo. Entre medias hay configuraciones que no producen ningún tipo de fuerza. Si ambas deltas son repulsivas el resultado es compatible con fluctuaciones no masivas de los campos. El teorema de Kenneth-Klich (ver [45]) dice que debido a principios generales de la QFT, la fuerza inducida por las fluctuaciones cuánticas de vacío entre dos cuerpos idénticos pero no necesariamente planos es siempre atractiva. Si el potencial tipo delta es atractivo hay estados ligados que pueden atrapar las las fluctuaciones cuánticas y aparecen problemas al imponer que el campo sea unitario. Se solventan si se equilibra la masa de las fluctuaciones con los autovalores de los estados ligados para que la absorción de fluctuaciones no sea posible. Si las dos constantes que modulan las deltas tienen el mismo signo, la parte real de la energía de Casimir es negativa porque siguiendo el teorema anterior la fuerza es atractiva. Si, por ejemplo, se estudiara un potencial combinación de delta y derivada primera de la delta ya no se reproduciría este resultado cuando las constantes que acompañan a las deltas fueran del mismo signo porque la situación no es simétrica ya que ambas deltas no tienen las mismas propiedades de paridad.





# Apéndice A

## Armónicos esféricos

### A.1. Grupo $SO(3)$

Dado un conjunto  $F$  de funciones  $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$  con estructura de espacio vectorial se considera el subespacio vectorial  $V_\ell$  de soluciones de la ecuación de Laplace. El laplaciano es invariante bajo rotaciones:

$$R : f \rightarrow f^R \quad \text{donde} \quad f^R(\vec{x}) = f(R^{-1}\vec{x}).$$

Este subespacio  $V_\ell$  es estable bajo  $SO(3)$  porque si  $f$  es polinomio de grado  $\ell$ , una transformación ortogonal  $R$  de estos polinomios produce otro polinomio de grado  $\ell$  solución de la ecuación de Laplace y que se puede expresar como combinación lineal de los polinomios no transformados. Los coeficientes forman una representación que se denomina  $D^{(\ell)}(R)$ .

Las representaciones irreducibles del grupo de rotaciones en 3D se pueden derivar a partir de la ecuación de Laplace considerando los polinomios homogéneos de grado  $\ell$ :

$$\nabla^2 f(x, y, z) = 0 \tag{A.1}$$

En general para resolver la ecuación de Laplace se introducen coordenadas esféricas en sustitución de las cartesianas. De esta manera los polinomios de grado  $\ell$  tienen la forma  $r^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi)$ . Si se introducen en la ecuación de Laplace en esféricas y se considera la parte angular se obtiene una ecuación diferencial en las variables  $(\theta, \phi)$  involucrando  $\ell$ . Hay  $2\ell + 1$  soluciones linealmente independientes que son los armónicos esféricos de grado  $\ell$ .

Dado un valor del parámetro  $\ell$  el grupo de los armónicos forma una base para el subespacio  $V_\ell$  soporte de una representación irreducible de dimensión  $2\ell + 1$  concreta del grupo  $SO(3)$ .

## A.2. Ecuación de Laplace en esféricas

Se puede resolver la ecuación de Laplace  $\nabla^2 f(x, y, z) = 0$  en coordenadas esféricas. Haciendo el cambio de variable correspondiente esta ecuación toma la forma:

$$\frac{\partial^2 f(r, \theta, \phi)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f(r, \theta, \phi)}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f(r, \theta, \phi)}{\partial \theta^2} + \frac{\cos(\theta)}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial f(r, \theta, \phi)}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 f(r, \theta, \phi)}{\partial \phi^2} = 0 \quad (\text{A.2})$$

La forma de resolverlo es por el método de separación de variables. La solución de la función  $f$  tendrá una dependencia formal de tipo:

$$f(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) \quad (\text{A.3})$$

Si se siguen los mismos razonamientos realizados en el *Capítulo 2* se llega a los ya conocidos resultados para la parte angular de la ecuación de Laplace:

$$\begin{aligned} \Theta(\theta) &= P_\ell^m(\cos(\theta)), \quad \ell \in \mathbb{Z}. \\ \Phi(\phi) &\propto e^{im\phi}, \quad -\ell \leq m \leq \ell. \\ Y_\ell^m(\theta, \phi) &\propto P_\ell^m(\cos(\theta)) e^{im\phi}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Al añadir la constante de separación  $\lambda$  se puede trabajar con la parte radial, de forma que la ecuación a resolver toma la forma:

$$\frac{r^2}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2r}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} = \lambda. \quad (\text{A.5})$$

Cuando se resolvió la parte angular se vio que había una dependencia entre esta constante de separación y el número cuántico orbital  $\ell$  de manera que  $\lambda = \ell(\ell + 1)$ . Se puede incorporar esta relación en (A.5) como sigue

$$r^2 \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + 2r \frac{dR(r)}{dr} = \ell(\ell + 1) R(r). \quad (\text{A.6})$$

La solución a esta ecuación es un polinomio de grado  $\ell$ :

$$R(r) \propto r^\ell. \quad (\text{A.7})$$

Uniendo todos los resultados se llega a que la solución buscada de la ecuación de Laplace es:

$$f(r, \theta, \phi) \propto r^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi). \quad (\text{A.8})$$

Si se quiere buscar la solución más general posible a la ecuación de Laplace (en los casos en los que las condiciones de contorno del problema aseguren que  $r \neq 0$ ) hay que escribir una expresión de tipo:

$$f'(r, \theta, \phi) = \sum [A_{lm}r^\ell + B_{lm}r^{-(\ell+1)}] Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (\text{A.9})$$

siendo  $A_{lm}$  y  $B_{lm}$  los coeficientes de la expansión en la serie de armónicos esféricos.

### A.3. Propiedades

Los armónicos esféricos son importantes en muchas áreas de la física. Por ejemplo, el modelo atómico del átomo de hidrógeno implica que cada electrón que está en un estado estacionario tiene una posición que se distribuye alrededor del núcleo como una distribución de probabilidad cuya variación angular viene dada por armónicos.

Como se ha comprobado, los armónicos esféricos son los vectores propios del laplaciano. Son funciones que tienen valores sobre la esfera de radio unidad parametrizada por  $(\theta, \phi)$ . Si se tiene en cuenta la fase de Condon-Shortley  $(-1)^m$  toman la forma exacta:

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} e^{im\phi} P_\ell^m(\cos\theta).$$

$$P_\ell^m(\cos\theta) = \frac{(-1)^{m+\ell}}{2^\ell \ell!} (1-\cos^2\theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{m+\ell}}{d(\cos\theta)^{m+\ell}} (\cos^2\theta - 1)^\ell. \quad (\text{A.10})$$

Cumplen unas relaciones de ortogonalidad y cierre.

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) Y_\ell^{m*}(\theta, \phi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) = \delta_{\ell,m} \delta_{\ell',m'}.$$

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell,m}^*(\theta', \phi') Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \delta(\phi - \phi') \delta(\cos\theta - \cos\theta'). \quad (\text{A.11})$$

A continuación aparece la forma funcional de los primeros armónicos esféricos a modo de ejemplo.

Los armónicos esféricos forman una representación de  $SO(3)$  de dimensión  $2\ell+1$ . El operador de Laplace conmuta con las rotaciones. A continuación se adjunta una gráfica de la forma tridimensional que adoptan los armónicos. Préstese especial atención a la variación en la simetría.

$$\begin{aligned}
Y_0^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} & Y_2^{-1}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi} \\
Y_1^{-1}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi} & Y_2^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\
Y_1^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta & Y_2^1(\theta, \varphi) &= \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \\
Y_1^1(\theta, \varphi) &= \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} & Y_2^2(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi} \\
Y_2^{-2}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi} & Y_3^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)
\end{aligned}$$

Al aumentar el valor del momento angular  $\ell$  se pierde la simetría esférica y es sustituida por simetrías más axiales.

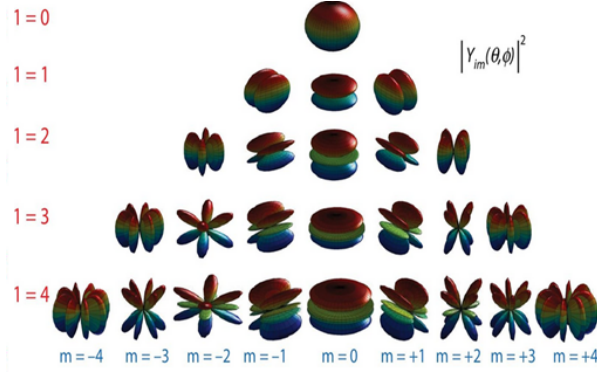


Figura A.1: Forma de los armónicos esféricos de orden más bajo.

Si se tiene una rotación general  $R$  se cumple:

$$R Y_\ell^m(\theta, \phi) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m'}(\theta, \phi) D^\ell(R)_m^{m'} \quad (\text{A.12})$$

Para demostrar que la representación es irreducible hay que demostrar que dada una matriz  $A$  genérica se cumple que  $AD^\ell = D^\ell A$  donde  $A$  sea proporcional a la identidad. Las clases de  $SO(3)$  están determinadas por el ángulo de rotación únicamente, no por la dirección del eje de rotación. Por eso se puede escoger una rotación que favorezca los cálculos, como una rotación alrededor del eje  $Z$  de un ángulo  $\alpha$  y entonces:

$$R_z(\alpha) Y_\ell^m(\theta, \phi) = Y_\ell^m(\theta, \phi - \alpha) = e^{-im\alpha} Y_\ell^m(\theta, \phi). \quad (\text{A.13})$$

Comparando ambos resultados se llega a la forma de  $D^\ell$ :

$$D^l[R_z(\alpha)] = \begin{pmatrix} e^{-il\alpha} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{-i(l-1)\alpha} & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & e^{il\alpha} \end{pmatrix}$$

Los armónicos esféricos forman una base para las representaciones irreducibles de  $SO(3)$  de dimensión  $2\ell + 1$ . Se demuestra con el primer lema de Schur. De la matriz  $D^\ell$  se ve que para que una matriz conmute con todas las rotaciones debe ser diagonal. Si se rota en otra dirección (se estudiaría el comportamiento de  $P_\ell^m$ ) la matriz constante debe ser proporcional a la identidad. Y por el primer lema de Schur, estas representaciones son irreducibles. Otras propiedades importantes de la representación  $D^\ell$  son las que siguen:

- *Son unitarias:*  $D^+(\alpha, \beta, \gamma) = D^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) = D(-\alpha, -\beta, -\gamma)$ .
- *Se pueden descomponer:*  $D^*[R_z(\Psi)] = D[R_y(\pi)R_z(\Psi)R_y(-\pi)]$ .
- *Tienen determinante unidad:*

$$|D[R_n(\Psi)]| = |D[RR_z(\Psi)R^{-1}]| = |D[R_z(\Psi)]| = 1, \quad \forall R.$$

- *Cumplen relaciones de ortonormalización:*

$$\int D_\mu^+(\Omega)_i^k D_\nu(\Omega)_\ell^j d\Omega = \delta_\mu^\nu \delta_i^j \delta_\ell^k.$$

Hay una conexión entre  $SO(3)$  y el momento angular y por ello la estructura de las representaciones irreducibles implica que en los sistemas con simetría esférica la energía de los vectores propios tiene degeneración  $2\ell + 1$ . Los vectores base de las representaciones del espacio  $V_\ell$  son vectores propios de un conjunto completo de observables compatibles que son los generadores de las rotaciones que se definen de la siguiente manera (con las relaciones de conmutación propias):

$$\begin{aligned} [J_i, J^2] &= 0 \\ J^2 |j, m\rangle &= j(j+1) |j, m\rangle \\ J_z |j, m\rangle &= m |j, m\rangle \end{aligned} \tag{A.14}$$

donde  $J^2$  es el operador Casimir porque conmuta con todos los del grupo, y por tanto, con todas las transformaciones del mismo (es decir,  $J^2$  es una matriz diagonal irreducible en esta base).



# Apéndice B

## Funciones de Bessel

### B.1. Funciones de Bessel

#### B.1.1. Definiciones

Las representaciones gráficas de todas las funciones de Bessel aparecen en cada uno de los capítulos del presente trabajo por lo que no se van a repetir aquí. Se procederá a dar las definiciones y propiedades matemáticas necesarias para el entendimiento de los cálculos desarrollados en el texto. Para más información, remito a la referencia [17].

Las funciones de Bessel son las soluciones de la siguiente ecuación diferencial lineal de segundo orden o de cualquiera de sus equivalentes:

$$x^2 \frac{d^2 y(x)}{dx^2} + x \frac{dy(x)}{dx} + (x^2 - \nu^2) y(x) = 0. \quad (\text{B.1})$$

Si se aplica el método de Frobenius para encontrar series de la forma

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+\lambda}, \quad (\text{B.2})$$

de la ecuación indicial se obtiene que  $\lambda = \pm\nu$ . Si se toma el valor positivo de  $\nu$  se obtienen las funciones de Bessel de primera especie.

**Definición B.1.1** *Funciones de Bessel de primera especie.*

$$J_\nu(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(n + \nu + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n} \quad (\text{B.3})$$

donde el radio de convergencia de la serie es infinito. La variable  $x$  puede ser real o compleja. Si el índice  $\nu$  de la función de Bessel pertenece a los números enteros,  $J_\nu(x)$  es una función entera.

Se trata de funciones oscilantes que se amortiguan cuando la variable sobre la que actúan tiende a valores muy grandes. Si  $2\nu \notin \mathbb{N}$  la segunda solución linealmente independiente de la ecuación diferencial (B.1) son las funciones de Bessel  $J_{-\nu}(x)$  que, al ser  $\nu > 0$ , presentan una singularidad en el origen (difiere del comportamiento regular de  $J_\nu(x)$  en ese punto). Si  $2\nu \in \mathbb{N}$  la segunda solución linealmente independiente de la ecuación diferencial (B.1) son las funciones de Bessel de segunda especie o funciones de Neumann.

**Definición B.1.2** *Funciones de Bessel de segunda especie.*

$$Y_\nu(x) = \frac{\cos(\nu\pi)J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)}{\operatorname{sen}(\nu\pi)}, \quad \forall \nu \in \mathbb{C}. \quad (\text{B.4})$$

Nuevamente, la variable  $x$  puede ser real o compleja.

Las funciones anteriormente descritas mantienen el carácter oscilante amortiguado cuando  $x$  tiende a infinito, con la única salvedad respecto a las de primera especie que el comportamiento en el origen es divergente. Tanto las funciones  $J_\nu(x)$  como  $Y_\nu(x)$  son holomorfas de  $x$  en el plano complejo cortado por el eje real negativo.

## B.1.2. Propiedades

A la hora de trabajar con estas funciones es útil conocer los siguientes resultados:

·*Simetría:*

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x) \quad \forall n \in \mathbb{Z}.$$

$$Y_{-n}(x) = (-1)^n Y_n(x) \quad \forall n \in \mathbb{Z}.$$

·*Fórmula de recurrencia (también se verifica para  $Y_\nu(x)$ ):*

$$\frac{2\nu}{x} J_\nu(x) = J_{\nu+1}(x) + J_{\nu-1}(x).$$

(B.5)

También se puede estudiar el comportamiento asintótico de estas funciones cuando el argumento tiende a infinito:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \infty} J_\nu(x) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[ \cos \left( x - \left[ \nu + \frac{1}{2} \right] \frac{\pi}{2} \right) - \frac{4\nu^2 - 1}{8x} \operatorname{sen} \left( x - \left[ \nu + \frac{1}{2} \right] \frac{\pi}{2} \right) \right] \\ \lim_{x \rightarrow \infty} Y_\nu(x) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[ \operatorname{sen} \left( x - \left[ \nu + \frac{1}{2} \right] \frac{\pi}{2} \right) - \frac{4\nu^2 - 1}{8x} \cos \left( x - \left[ \nu + \frac{1}{2} \right] \frac{\pi}{2} \right) \right] \end{aligned}$$



Finalmente, cuando el argumento tiende a cero y  $0 < x \ll \sqrt{\nu + 1}$  se tiene:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} J_\nu(x) &= \frac{1}{\Gamma(\nu + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \\ \lim_{x \rightarrow 0} Y_\nu(x) &= \begin{cases} \frac{2}{\pi} [\ln(\frac{x}{2}) + \gamma], & \text{si } \nu = 0 \\ -\frac{\Gamma(\nu)}{\pi} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu, & \text{si } \nu > 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

donde  $\gamma$  es la constante de Euler-Mascheroni.

## B.2. Funciones de Bessel modificadas

### B.2.1. Definiciones

Si se sustituye en todo el formalismo anterior el argumento  $x \rightarrow ix$  se obtienen las funciones de Bessel modificadas, que son soluciones linealmente independientes de la siguiente ecuación diferencial de segundo orden:

$$x^2 \frac{d^2 y(x)}{dx^2} + x \frac{dy(x)}{dx} - (x^2 + \nu^2) y(x) = 0. \quad (\text{B.7})$$

Para resolverla, se aplica nuevamente el método de Frobenius y de la ecuación indicial se obtienen los mismos valores  $\lambda = \pm\nu$ . Si se toma el valor positivo de  $\nu$  se obtienen las funciones de Bessel modificadas de primera especie.

**Definición B.2.1** *Funciones de Bessel modificadas de primera especie.*

$$I_\nu(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! \Gamma(n + \nu + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n}, \quad (\text{B.8})$$

donde la variable  $x$  puede ser real o compleja.

Se trata de funciones exponencialmente crecientes cuando crece el argumento. Cuando  $x$  tiende a cero, si  $\nu > 0$ , entonces  $I_\nu(x)$  tiende a cero. Si  $\nu = 0$  la función es finita en ese límite, comportándose de manera regular. Si  $2\nu \notin \mathbb{Z}$  la segunda solución linealmente independiente de la ecuación diferencial (B.7) son las funciones de Bessel  $I_{-\nu}(x)$  que, al ser  $\nu > 0$ , presentan una singularidad en el origen (difiere del comportamiento regular de  $I_\nu(x)$  en ese punto). Si  $2\nu \in \mathbb{Z}$  la segunda solución linealmente independiente de la ecuación diferencial (B.7) son las funciones de Bessel modificadas de segunda especie.

**Definición B.2.2** *Funciones de Bessel modificadas de segunda especie.*

$$K_\nu(x) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)}{\operatorname{sen}(\nu\pi)}, \quad \forall \nu \in \mathbb{C}. \quad (\text{B.9})$$

Nuevamente, la variable  $x$  puede ser real o compleja.

Las funciones anteriores decrecen exponencialmente cuando aumenta el argumento, al contrario que las de primera especie. Además, el comportamiento en el origen es divergente.

### B.2.2. Propiedades

A la hora de trabajar con estas funciones es útil conocer los siguientes resultados:

· *Relación con las funciones de Bessel ordinarias:*

$$I_\nu(x) = e^{-i\nu\frac{\pi}{2}} J_\nu(ix).$$

$$I_{-\nu}(x) = e^{i\nu\frac{\pi}{2}} J_{-\nu}(ix).$$

· *Fórmula de recurrencia (válida para  $e^{i\pi\nu} K_\nu(x)$ ):*

$$I_{\nu-1} - I_{\nu+1} = \frac{2\nu}{x} I_\nu(x).$$

(B.10)

También se puede estudiar el comportamiento asintótico de estas funciones cuando el argumento tiende a infinito:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} I_\nu(x) \approx \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}} \left( 1 + \frac{(1-2\nu)(1+2\nu)}{8x} + \dots \right).$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} K_\nu(x) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}.$$

Finalmente, se puede analizar el comportamiento en el caso contrario, cuando el argumento tiende a cero. En el caso en el que se verifique  $0 < x \ll \sqrt{\nu+1}$  se tiene:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} I_\nu(x) &\approx \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu, \\ \lim_{x \rightarrow 0} K_\nu(x) &\approx \begin{cases} -\ln\left(\frac{x}{2}\right) - \gamma, & \text{si } \nu = 0, \\ \frac{\Gamma(\nu)}{2} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu, & \text{si } \nu > 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

donde  $\gamma$  es la constante de Euler-Mascheroni.

# Bibliografía

- [1] N. Graham, R. Jaffe, H. Weigel, (2002).
- [2] M. Gadella, J. Mateos-Guilarte, J. M. Muñoz-Castaneda and L. M. Nieto, J. Phys. A **49** (2016) no.1, 015204.
- [3] M. Gadella, J. Negro and L.M. Nieto. Phys. Lett. A **373**, 1310-1313 (2009).
- [4] J.J Álvarez-Sánchez, M. Gadella, F.J.H. Heras, and L.M. Nieto. Phys. Lett. A **373**, 4022-4027 (2009).
- [5] M. Gadella, F.J.H Heras, J. Negro and L.M. Nieto. J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 465207 (11pp) (2009).
- [6] D. J. Fernandez C, M. Gadella and L. M. Nieto, SIGMA **7** (2011) 029.
- [7] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R Peres, K.S,Novoselov and A. K. Geim Rev. Mod. Phys. **81**,109 (2009).
- [8] H. B. G. Casimir, Indag. Math. **10** (1948) 261.
- [9] M. Bordag and J. M. Muñoz-Castañeda, Phys. Rev. D **91** (2015) no.6, 065027.
- [10] J. M. Muñoz-Castañeda and J. Mateos Guilarte, Phys. Rev. D **91** (2015) no.2, 025028.
- [11] J. M. Muñoz-Castaneda, J. Mateos Guilarte and A. M. Mosquera, Phys. Rev. D **87** (2013) no.10, 105020.
- [12] J.M.Muñoz Castañeda, T.R Govindarajan. Mod. Phys. Lett. A **31**, 1650210 (2016).
- [13] J. Cayssol, Comptes Rendus Physique. **14** (2013) 760.
- [14] E. Witten, Riv. Nuovo Cim. **39** (2016) n7.

- [15] M. Asorey, J.M. Muñoz-Castañeda. *Nuclear Phys. B* **874**, 852-876, (2013).
- [16] I. Klich1 and O. Kenneth. *Journal of Physics Conference Series* **161** (2009) 012020.
- [17] F. W. J. Olver, et al. *NIST Handbook of Mathematical Functions*. Cambridge University Press (2010).
- [18] J. Wheeler, It from bit, Sakharov Memorial Lecture on Physics, vol. 2, L. Keldysh and V. Feinberg, Nova (1992).
- [19] L.Bombelli, R.K. Koul, J. Lee and R.D. Sorkin, *Phys. Rev. D***34**, 373 (1986).
- [20] M. Srednicki, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 666 (1993).
- [21] G. t Hooft, *Nucl. Phys. B* **256**, 727 (1985).
- [22] M. Asorey, A.P. Balachandran and J.M. Pérez-Pardo. Springer (2013). doi:10.1007/JHEP12(2013)073.
- [23] A. Ibort and J.M. P érez-Pardo, *SIAM J. Numer. Anal.* **51** (2013) 1254.
- [24] M. Hasan and C. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82** (2010) 3045 [arXiv:1002.3895] [INSPIRE].
- [25] S.-Q. Shen, *Springer Series on Solid State Sciences* **174**, Springer Germany (2012).
- [26] A. Balachandran, L. Chandar, E. Ercolessi, T. Govindarajan and R. Shankar, *Int. J. Mod. Phys. A* **9** (1994) 3417 [INSPIRE].
- [27] M. Asorey, A. Ibort and G. Marmo, *Int. J. Mod. Phys. A* **20** (2005) 1001 [hep-th/0403048] [INSPIRE].
- [28] P. Roman *Advanced Quantum Theory*. Adisson-Wesley Publishing Company, INC.,1965.
- [29] C.D.Hoyle et al.,*Phys.Rev.Lett.* **86** (2001)1418.
- [30] E. G. Adelberger, B. R.Heckel and A. E. Nelson, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **53** (2003) 77.
- [31] D. J. Kapner et al, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 021101.

- [32] R. Onofrio, *New J. Phys.* **8** (2006) 237.
- [33] R. S. Decca et al, *Eur. Phys. J. C* **51** (2007) 963.
- [34] G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen and V. M. Mostepanenko, *Phys. Rev. D* **86** (2012) 065025.
- [35] C.D. Fosco, , F.C. Lombardo, F.D. Mazzitelli. *Phys. Rev. D* **80**, 085004 (2009).
- [36] P. Parashar, K.A. Milton, K.V Shajesh, M. Schaden. *Phys. Rev. D* **80**, 085021 (2012).
- [37] M Asorey, JM Munoz-Castaneda. *Nuclear Physics B* **874** (3), 852-876.
- [38] J. N. Munday, F. Capasso and V. A. Parsegian, *Nature*, **457** (2009) 170.
- [39] M. Levin et al., *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 090403.
- [40] Taylor J R. *Scattering Theory* (New York:Wiley) 1972.
- [41] Beauregard M, Bordag M, Kirsten K. *Journal of Physics Conference Series* **48** (2015) 095401.
- [42] Gilkey PB, Kirsten K and Vassilevich D V, 2001. *Nucl. Phys. B* **601** 125-48.
- [43] A. Bulgac, P. Magierski and A. Wirzba, *Phys. Rev. D* **73**, 025007 (2006) [arXiv:hep-th/0511056].
- [44] T. Emig, N. Graham, R. L. Jaffe and M. Kardar, [arXiv:0710.3084].
- [45] O.Kenneth,I.Klich, *Phys.Rev.Lett.* **97**(2006)160401.
- [46] M. Gadella and L.M. Nieto. *Métodos matemáticos avanzados para ciencias e ingenierías*. Universidad de Valladolid: Secretariado de Publicaciones (2000).
- [47] R. Eisberg and R. Resnick *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles*. John Wiley & Sons Inc; Edition: Revised, 1985. 155-156.
- [48] R.M. Wald. *Quantum Field Theory in Curved Spacetime and Black Hole Thermodynamics*. The University of Chicago Press, 1994.
- [49] Greiner, W. *Relativistic Quantum Mechanics. Wave Equations*. Springer (2000).

- [50] C. Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics*. Wiley-VCH, 1977.
- [51] Wu-Ki Tung *Group theory in physics*. World Scientific, Singapore, 1985.
- [52] E. P. Wigner *Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra*. Academic Press, INC. 1959.
- [53] M. Bordag, G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen and V. M. Mostepanenko, *Int. Ser. Monogr. Phys.* **145** (2009) 1.
- [54] S. W. Hawking, *Commun. Math. Phys.* **43** (1975) 199.
- [55] K.A. Milton *The Casimir Effect: Physical Manifestations of Zero-Point Energy*. World Scientific Pub Co Inc (2001).
- [56] K.Kirsten. *Spectral functions in mathematics and physics*. Chapman & Hall/CRC (2000).