

# FUNCIONES DE GREEN Y APLICACIONES EN FÍSICA

Trabajo de Fin de Grado

Autor:

Pablo Barreiro Carrasco

23 Julio de 2019



---

**Universidad de Valladolid**

Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica

Tutor:

Luis Miguel Nieto Calzada



# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>v</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Objetivo . . . . .	2
1.2. Directrices . . . . .	2
<b>2. Funciones de Green en física matemática</b>	<b>3</b>
2.1. Introducción a las distribuciones: delta de Dirac . . . . .	3
2.2. Concepto de función de Green . . . . .	5
2.3. Problema de Sturm-Livouille inhomogéneo . . . . .	8
2.3.1. Función de Green asociada al operador de Sturm-Livouille . . . . .	10
2.3.2. Expansión de la función de Green en serie de autofunciones . . . . .	13
2.4. Ejemplos prácticos . . . . .	13
2.5. Métodos para la determinación de la función de Green . . . . .	18
2.5.1. Método de separación de variables de Bernouilli . . . . .	18
2.5.2. Método de la transformada integral . . . . .	19
<b>3. Funciones de Green en física clásica</b>	<b>23</b>
3.1. Oscilador armónico . . . . .	23
3.2. Oscilador armónico amortiguado . . . . .	27
3.3. Ecuación del calor . . . . .	30
3.4. Ecuación de ondas . . . . .	34
<b>4. Funciones de Green en mecánica cuántica</b>	<b>35</b>
4.1. Función de Green independiente del tiempo . . . . .	35
4.1.1. Funciones de Green y teoría de perturbaciones . . . . .	40
4.2. Aplicaciones a la teoría de dispersión . . . . .	41
4.2.1. Teoría de dispersión . . . . .	45
4.3. Oscilador armónico cuántico . . . . .	46
4.4. Función de Green dependiente del tiempo . . . . .	49
4.4.1. Ecuación diferencial de primer orden respecto del tiempo . . . . .	49
4.4.2. Integral de Caminos de Feynman . . . . .	52
4.5. Ejemplo de funciones de Green dependientes del tiempo . . . . .	53
4.5.1. Partícula libre . . . . .	54

4.5.2. Oscilador armónico . . . . .	55
<b>5. Funciones de Green en la teoría electromagnética</b>	<b>57</b>
5.1. Electrostática . . . . .	57
5.1.1. Esfera conductora . . . . .	60
5.2. Potenciales de retardo . . . . .	61
<b>6. Conclusiones</b>	<b>65</b>

# Índice de figuras

2.1. La función $G_1(x, x')$ esta definida en el área sombreada. Y la función $G_2(x, x')$ esta definida en el área no sombreada. . . . .	12
2.2. Contorno de integración entorno al polo simple $z_0$ . . . . .	21
2.3. Contorno de integración considerado en la demostación del Teorema 2.5.3. En verde se muestran los polos sobre el eje real. . . . .	22
3.1. Contorno de integración para el oscilador armónico simple . . . . .	25
3.2. Función de Green del oscilador armónico (3.1.15) para una masa unitaria y frecuencias $\omega_0 = 4$ a la izquierda y frecuencias $\omega_0 = 8$ a la derecha. . . . .	26
3.3. Contorno de integración para el oscilador armónico amortiguado. . . . .	28
3.4. Función de Green del oscilador armónico subamortiguado (3.2.12). . . . .	29
3.5. Función de Green del oscilador armónico sobreamortiguado (3.2.14). . . . .	30
3.6. Función de Green del oscilador armónico para el amortiguamiento crítico (3.2.16). . . . .	31
3.7. Contorno de integración sobre el semiplano superior. . . . .	32
3.8. Contorno de integración sobre el semiplano inferior. . . . .	33
4.1. Discontinuidad del plano complejo $z$ en los autovalores $\hat{L}$ . . . . .	37
4.2. Polos de la función de Green asociada a una partícula libre para $E \geq 0$ . . . . .	43
4.3. Polos de la función de Green asociada a una partícula libre para $E \leq 0$ . . . . .	44
4.4. Esquema del proceso scattering por un potencial $V(\mathbf{r})$ . . . . .	45
4.5. Diagrama vectorial del proceso de scattering. . . . .	46
4.6. Diferentes contornos de integración en el $\omega$ - plano complejo que se consideran en (4.4.6). . . . .	51
4.7. Camino integral en “ziga-zag”. . . . .	53
5.1. Esfera conductora y carga puntual $q_0$ . . . . .	60



# Agradecimientos

Después de un largo periodo de aprendizaje a lo largo de estos últimos años, al fin, presento este trabajo como conclusión al Grado en Física. Ha sido un periodo de aprendizaje y de gran importante en mi vida, tanto en lo referente al estudio como en mi desarrollo personal.

Agradecer a mi tutor, Luis Miguel Nieto, por su apoyo en las situaciones adversas, al igual que por la cercanía y comprensión, pese a lo particular de mi situación. A mi familia y amigos, quienes han sido un gran apoyo durante este proceso y en quienes sé que puedo confiar. Sobre todo a mis padres quienes me han permitido llega hasta donde he llegado. Y en especial a mi madre, por su apoyo para superar los obstáculos que se han planteado a lo largo del camino, los cuales no han sido pocos.

Han sido años inolvidables por Valladolid donde he forjado amistades con personas que nunca olvidaré. Esperó tener la misma suerte que he tenido en todos los proyectos que emprenda a partir de ahora. Por todo ello, gracias a todos.



*Dedicado a mi primo "Pepe"*



# Resumen

En este trabajo se presenta el método de las funciones de Green, una técnica matemática para la resolución de ecuaciones diferenciales con condiciones de contorno inhomogéneas. Posteriormente, se aplica al estudio de las principales ecuaciones de las diferentes ramas de la física: clásica, cuántica y electromagnetismo.

La base de este método se centra en determinar la función de Green asociada a una determinada ecuación diferencial. Esta función es la solución a la ecuación diferencial para un término inhomogéneo que viene representado por la delta de Dirac  $\delta(x - x')$ . Por lo cual, el trabajo se centra en resolver ecuaciones en las que interviene un término delta de Dirac.

En este trabajo, puramente teórico, se obtienen las funciones de Green relativas a las principales ecuaciones en física-matemática que se han visto en el Grado. Estas funciones se podrán utilizar para la resolución posterior del correspondiente problema inhomogéneo.

# Abstract

In this work is presented the method of the functions of Green, a mathematical technique for solving differential equations with inhomogeneous contour conditions. Subsequently, it is applied to the study of the main equations of the different branches of Physics: classical, quantum and electromagnetism.

The basis of this method focuses on determining the function of Green associated with a determined differential equation. This function is the solution to the equation for an inhomogeneous term that is represented by the Dirac delta  $\delta(x-x')$ . Therefore, the work focuses on solving differential equations in which a Dirac delta term is involved.

In this work, purely theoretical, we obtain the functions of Green related to the main equations in physics-mathematics which have been seen in the Degree. These functions can be used for the subsequent resolution of the corresponding inhomogeneous problem.



# 1

## Introducción

Numerosos problemas en física matemática se pueden resolver en términos de ciertas funciones armónicas, definidas en ciertos dominios para unas condiciones de contorno dadas. Este problema se conoce como el *problema de Dirichlet*. En la segunda mitad del siglo diecinueve numerosos matemáticos estudiaron este problema con el objetivo de obtener una solución explícita. Sin embargo, años atrás el británico George Green, ya lo había estudiado en diferentes dominios y condiciones de contorno, exponiendo los resultados en su ensayo *Application of Mathematical Analysis to the Theories of Electricity and Magnetism* publicado en 1828. En esta obra aborda el problema a través de las *funciones de Green*, además de introducir conceptos matemáticos fundamentales en la teoría electromagnética.

Las funciones que ahora denominamos, funciones de Green, tienen numerosas aplicaciones en física matemática, ya que constituye un método muy potente para abordar el estudio de los problemas de condiciones de contorno. Una descripción moderna de estas funciones, requiere introducir el concepto de la distribución delta de Dirac. Por lo tanto, el conocimiento de esta distribución es esencial para luego introducir el concepto de función de Green.

Dada una ecuación diferencial asociada a un operador diferencial lineal  $\mathcal{L}$  en un cierto dominio, la función de Green se define como la solución cuando el término inhomogéneo viene representado por una delta de Dirac.

$$\mathcal{L}[G(x, x')] = \delta(x - x'), \quad (1.0.1)$$

donde  $G(x, x')$  es la función de Green. De esta forma la solución al problema inhomogéneo

$$\mathcal{L}[u(x)] = f(x), \quad (1.0.2)$$

se puede construir a partir de la superposición de los términos elementales (representados por la delta de Dirac) que conforman el término inhomogéneo  $f(x)$ . De forma matemática esto se expresa de la siguiente manera:

$$u(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x')f(x')dx'. \quad (1.0.3)$$

En la expresión anterior queda reflejada la gran utilidad de este método. De esta forma, si se consigue obtener la función de Green, la solución al problema inhomogéneo asociado se reduce al cálculo de una integral.

## 1.1. Objetivo

En consonancia con lo mencionado anteriormente, el objetivo principal de este trabajo es encontrar el procedimiento para el cálculo de las funciones de Green asociadas a las ecuaciones “más importantes” de la física. De esta forma, el lector podrá encontrar todos los desarrollos matemáticos, de forma clara, relativos a ciertos problemas físicos y en el dominio de las condiciones de contorno más frecuentes. Además, también podrá encontrar en este texto un pequeño manual de consulta en el que encontrará la función de Green que le permita obtener la solución a un problema inhomogéneo específico.

## 1.2. Directrices

En el **Capítulo 2** se analizará de forma matemática las funciones de Green, estudiando sus principales propiedades, así como los métodos de cálculo. Una gran parte del capítulo se dedicará a resolver el problema matemático de Sturm-Liouville mediante el método de las funciones de Green. Dado el versatilidad que representa la ecuación de Sturm-Liouville en el estudio de las ecuaciones diferenciales se justifica su estudio. Posteriormente, en los capítulos siguientes se abordará el estudio de diferentes sistemas físicos mediante el método de las funciones de Green. Lo relativo a sistemas clásicos en física aplicada se abordará en el **Capítulo 3**, en el que se analizará el oscilador armónico simple y amortiguado. También, se considerarán ecuaciones en derivadas parciales como la ecuación de difusión del calor y la ecuación de ondas. Los sistemas cuánticos serán estudiados en el **Capítulo 4**. En este capítulo se considerará la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y dependiente del tiempo, obteniéndose una expresión genérica de la función de Green para un Hamiltoniano arbitrario. Posteriormente, esta expresión se particularizará para diferentes ejemplos. Las aplicaciones de las funciones de Green en la teoría electromagnética se abordarán en el **Capítulo 5**. Se estudiará la ecuación de Poisson, que es fundamental en la resolución de los problemas electrostáticos, así como la obtención de los potenciales de retardo. Finalmente, en el **Capítulo 6** se expondrán una serie de conclusiones acerca del trabajo realizado.

— “*Pure mathematics is, in its way, the poetry of logical ideas.*”

— Albert Einstein —

# 2

## Funciones de Green en física matemática

Las funciones de Green tienen numerosas aplicaciones en física matemática, ya que constituyen un método muy potente para abordar el estudio de los problemas de condiciones de contorno. Antes de introducir el concepto de función de Green es necesario introducir el concepto de la delta de Dirac. Por lo tanto, en primer lugar analizaremos las principales características de esta distribución para luego introducir el concepto de función de Green. Seguidamente, se estudiará el problema de Sturm-Livouille mediante este procedimiento, debido a su gran interés. Esto se debe a la gran versatilidad de la ecuación de Sturm-Livouille, que hace que numerosas ecuaciones de segundo orden se puedan expresar de dicha forma. Finalmente, comentaremos dos métodos ampliamente utilizados en la determinación de las funciones de Green: el método de separación de variables de Bernoulli y el método de la transformada integral.

### 2.1. Introducción a las distribuciones: delta de Dirac

Como hemos mencionado, antes de introducir la noción de función de Green, es necesario tomar en consideración el concepto de la delta de Dirac. Aquí daré sólo un sencillo esbozo de la teoría, sin entrar en demasiados detalles técnicos sofisticados, que pueden ser consultados en [1] o en las referencias más especializadas que se citan allí. Una manera formalmente sencilla de definir la delta de Dirac en una dimensión, que es una distribución, puede ser considerando la aplicación lineal y continua que actúa sobre un espacio de funciones prueba  $\mathbb{D}$  (que para nuestro caso puede tomarse como el espacio de Schwartz  $\mathcal{S}(\mathbb{R})$  de las funciones indefinidamente derivables que

tienden a cero en  $\pm\infty$  más rápido que el inverso de cualquier polinomio) de la siguiente manera: dada una función  $\varphi(x) \in \mathbb{D}$ , la acción de la delta de Dirac centrada en  $x_0 \in \mathbb{R}$  es

$$\delta_{x_0}(\varphi) \equiv \langle \delta_{x_0} | \varphi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) \varphi(x) dx = \varphi(x_0). \quad (2.1.1)$$

En el caso de que  $x_0 = 0$ , tenemos la delta en el origen,  $\delta_{x_0}(\varphi) \equiv \delta_0$ . Sin embargo, para profundizar de manera menos formal en su significado físico, se suele definir la delta de Dirac mediante el límite “débil” de una sucesión de funciones  $\{f_n(x)\}$  tales que todas ellas verifican

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_n(x) dx = 1, \quad (2.1.2)$$

de modo que, tomando el límite “débil” que no hay convergencia punto a punto, se tiene que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_n(x) \varphi(x) dx = \varphi(0) \equiv \langle \delta_0 | \varphi \rangle, \quad \forall \varphi(x) \in \mathbb{D}. \quad (2.1.3)$$

### Propiedades de la delta de Dirac

Mencionaremos aquí las principales propiedades de la distribución delta de Dirac [16]:

- $\delta(-x) = -\delta(x)$ .
- $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ ,  $a \in \mathbb{R} - \{0\}$ .
- Si  $g(x)$  es una función que está bien definida en  $x = a$ , entonces

$$g(x) \delta(x - a) = g(a) \delta(x - a).$$

- Si  $[b, c] \subset \mathbb{R}$  entonces:

$$\int_b^c \delta(x - a) \varphi(x) dx = \begin{cases} \varphi(a) & \text{si } a \in (b, c). \\ 0 & \text{si } a \notin [b, c]. \end{cases} \quad (2.1.4)$$

- $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y) \delta(x - z) dx = \delta(y - z)$ .
- Sea  $g(x)$  es una función que tiene ceros simples en un conjunto discreto de puntos  $\{x_i\}$ , entonces

$$\delta[g(x)] = \sum_i \frac{1}{|g'(x_i)|} \delta(x - x_i). \quad (2.1.5)$$

- La derivada de la función de Heaviside

$$H(x - x_0) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < x_0, \\ 1 & \text{si } x > x_0, \end{cases}$$

es precisamente

$$\frac{dH(x - x_0)}{dx} = \delta(x - x_0). \quad (2.1.6)$$

- La derivada  $n$ -ésima de la delta de Dirac es otra distribución que actúa sobre las funciones de prueba  $\varphi(x)$  de la siguiente manera:

$$\delta_{x_0}^n = \int_{-\infty}^{\infty} \delta_{x_0}^{(n)}(x) \varphi(x) dx = (-1)^n \left. \frac{d^n \varphi(x)}{dx^n} \right|_{x=x_0} = (-1)^n \varphi^{(n)}(x_0). \quad (2.1.7)$$

- La definición de la delta de Dirac se puede extender a más de una dimensión de manera trivial. En concreto, se puede demostrar que la delta de Dirac tridimensional en coordenadas cartesianas, esféricas y cilíndricas viene dada por:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z'). \quad (2.1.8)$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r - r') \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi'). \quad (2.1.9)$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\delta(\rho - \rho')}{\rho} \delta(\phi - \phi') \delta(z - z'). \quad (2.1.10)$$

- Un resultado muy importante en teoría de clásica de campos es que el Laplaciano en tres dimensiones de la función  $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  es precisamente una delta de Dirac:

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.1.11)$$

- La transformada de Fourier de una onda plana también es una delta de Dirac:

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} dk \quad (2.1.12)$$

## 2.2. Concepto de función de Green

La función de Green  $G(x, x')$  asociado a un operador diferencial lineal  $\mathcal{L}$  en una variable  $x \in \mathbb{R}$  (aunque también podría considerarse que fuera en derivadas parciales) viene definida por la siguiente ecuación:

$$\mathcal{L}[G(x, x')] = \delta(x - x'), \quad (2.2.1)$$

que se cumple en un dominio  $D \subset \mathbb{R}^2$  y sometido a unas condiciones de contorno  $\mathcal{B}[G(x, x')] = 0$  en  $\partial D$  (la frontera de  $D$ , donde  $\mathcal{B}$  es un operador diferencial lineal ordinario (o parcial) de orden menor que  $\mathcal{L}$ ). Si  $D$  se corresponde a todo el espacio euclídeo, entonces se dice que la solución al sistema es *fundamental o (singular)*. Para entender mejor el concepto de la función de Green consideremos a continuación el siguiente ejemplo relativo a una ecuación diferencial ordinaria.

**Ejemplo** Analicemos el siguiente problema relativo a la ecuación diferencial de segundo orden:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + k^2u = f(x), \quad 0 < x < l, \quad (2.2.2)$$

de manera que, en este caso, el operador diferencial es:

$$\mathcal{L} := \frac{d^2}{dx^2} + k^2, \quad \mathcal{L}[u(x)] := \frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2u(x).$$

Además, debemos considerar las siguientes condiciones de contorno de Dirichlet:

$$u(0) = u(l) = 0.$$

La solución general a la ecuación (2.2.2) es:

$$u(x) = A(x) \cos(kx) + B(x) \sin(kx). \quad (2.2.3)$$

Las funciones  $A(x)$  y  $B(x)$  se determinan a partir del método de variación de las constantes, de modo que tenemos que resolver el sistema:

$$A'(x) \cos(kx) + B'(x) \sin(kx) = 0. \quad (2.2.4)$$

$$-kA'(x) \sin(kx) + kB'(x) \cos(kx) = f(x). \quad (2.2.5)$$

Luego:

$$A'(x) = -\frac{f(x) \sin(kx)}{k}, \quad B'(x) = \frac{f(x) \cos(kx)}{k}. \quad (2.2.6)$$

Integrando ambas expresiones y sustituyendo en (2.2.3) obtenemos la solución general a (2.2.2):

$$u(x) = -\frac{\cos(kx)}{k} \int_a^x f(y) \sin(ky) dy + \frac{\sin(kx)}{k} \int_b^x f(y) \cos(ky) dy. \quad (2.2.7)$$

A continuación, aplicando las condiciones de contorno, determinamos las dos constantes de integración  $a$  y  $b$ . De la condición de contorno  $u(0) = 0$  se deduce que

$$\int_a^0 f(y) \sin(ky) dy = 0. \quad (2.2.8)$$

Puesto que no conocemos la forma de  $f(x)$ , la única opción es  $a = 0$ . De forma similar aplicamos la segunda condición de contorno  $u(\ell) = 0$ :

$$\frac{1}{k} \int_0^\ell f(y) \sin[k(y - \ell)] dy = \frac{\sin(k\ell)}{k} \int_b^0 f(y) \cos(ky) dy$$

donde hemos utilizado la relación para el seno del ángulo resta. Sustituyendo esta expresión en (2.2.7) y simplificando obtenemos

$$\begin{aligned} u(x) &= -\frac{1}{k} \int_0^x f(y) \sin[k(y - x)] dy + \frac{\sin(kx)}{k \sin(kl)} \int_0^l f(y) \sin[k(y - l)] dy \\ &= \int_0^x -f(y) \frac{\sin(ky) \sin[k(l - x)]}{k \sin(kl)} dy + \int_x^l -f(y) \frac{\sin(kx) \sin[k(l - y)]}{k \sin(kl)} dy \\ &= \int_0^l f(y) G(x, y) dy. \end{aligned} \tag{2.2.9}$$

Finalmente, definimos  $G(x, y)$  como:

$$G(x, y) = \begin{cases} -\frac{\sin(ky) \sin[k(l - x)]}{k \sin(kl)} & \text{si } 0 \leq y \leq x. \\ -\frac{\sin(kx) \sin[k(l - y)]}{k \sin(kl)} & \text{si } x \leq y \leq l. \end{cases} \tag{2.2.10}$$

Por lo tanto, la función de Green  $G(x, y)$  es una función de dos variables. Su utilidad en el estudio de los problemas inhomogéneos de condiciones de contorno radica en que la función de Green es independiente del término de forzaje (término no homogéneo  $f$ ). De esta forma, la solución al problema homogéneo, para cualquier término de forzaje, se puede determinar a partir de la función de Green, resolviendo la integral (2.2.9). A lo largo de este capítulo veremos como construir la función de Green para diferentes problemas. A continuación, examinemos algunas propiedades de la función de Green  $G(x, y)$  (2.2.10):

- Satisface la ecuación diferencial  $G'' + k^2 G = 0$  en el intervalo  $0 \leq y \leq x$  y  $x \leq y \leq l$ .
- La función  $G$  es continua en la recta  $x = y$ , dado que:

$$\lim_{y \rightarrow x^-} G(x, y) = \frac{\sin(kx) \sin[k(l - x)]}{k \sin(kl)} = \lim_{y \rightarrow x^+} G(x, y).$$

- La derivada parcial es discontinua en  $x = y$ .

$$G'_y(x, x^-) = \lim_{y \rightarrow x^-} G'_y(x, y) = \frac{\cos(kx) \sin[k(l - x)]}{\sin(kl)}$$

$$G'_y(x, x^+) = \lim_{y \rightarrow x^+} G'_y(x, y) = -\frac{\sin(kx) \cos[k(l - x)]}{\sin(kl)}$$

por lo tanto  $G'_y(x, x^+) - G'_y(x, x^-) = -1$ .

- Satisface las condiciones de contorno:  $G(x, 0) = G(x, l) = 0$ .
- La función es simétrica en sus argumentos (reciprocidad):  $G(x, y) = G(y, x)$ .

Finalmente, concluiremos esta sección introduciendo el siguiente Teorema fundamental, que resume el desarrollo de la teoría de las funciones de Green.

**Teorema 2.2.1** *La función de Green  $G(x, x')$  asociada a la ecuación diferencial  $\mathcal{L}[u(x)] = f(x)$  en el dominio  $D$  y con las condiciones de contorno  $\mathcal{B}[G(x, x')] = 0$ , es la solución a la ecuación diferencial*

$$\mathcal{L}[G(x, x')] = \delta(x - x'). \quad (2.2.11)$$

Entonces, la solución a  $\mathcal{L}[u(x)] = f(x)$  se puede expresar:

$$u(x) = \int_D G(x, x') f(x') dx'. \quad (2.2.12)$$

**Demostración** La demostración de este resultado se obtiene aplicando el operador  $\mathcal{L}$  a ambos lados de la expresión (2.2.12):

$$\mathcal{L}[u(x)] = \int_D \mathcal{L}[G(x, x')] f(x') dx = \int_D \delta(x - x') f(x') dx' = f(x).$$

Luego, obtenemos la ecuación original que demuestra el resultado.

## 2.3. Problema de Sturm-Livouille inhomogéneo

En esta sección estudiaremos el problema de Sturm-Livouille inhomogéneo mediante el método de funciones de Green. La razón para estudiar este problema tiene su germen en la gran variedad de ecuaciones diferenciales de segundo orden y de interés físico, que se pueden escribir en forma de una ecuación de tipo Sturm-Livouille.

### Problema de Sturm-Livouille

Se llama *problema de Sturm-Livouille* al problema de condiciones de contorno homogéneas, asociadas a la ecuación de Sturm-Livouille. En primer lugar, consideremos el operador de Sturm-Livouille  $\mathcal{L}$ :

$$\mathcal{L} := \frac{1}{w(x)} \left[ \frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{d}{dx} \right) + q(x) \right], \quad (2.3.1)$$

donde  $p(x), p'(x), q(x)$  y  $w(x)$  son funciones reales continuas en el intervalo  $a \leq x \leq b$ . La función  $w(x)$  se suele denominar función peso. La ecuación de Sturm-Livouille se puede escribir entonces de la siguiente manera:

$$\mathcal{L}y(x) = -\lambda y(x). \quad (2.3.2)$$

donde  $\lambda$  es un parámetro que se debe determinar. En esta epigrafe, no nos centraremos en estudiar el espacio vectorial que conforman las autofunciones del operador de Sturm-Livouille, pues lo podemos encontrar en [2]. Sin embargo, si consideraremos la definición del producto escalar sobre este espacio de funciones. Sea  $f(x)$  y  $g(x)$  dos autofunciones, entonces:

$$\langle f(x)|g(x) \rangle = \int_a^b f^*(x)g(x)w(x) dx. \quad (2.3.3)$$

Por lo tanto, ya podemos ver en qué condiciones el operador  $\mathcal{L}$  es hermítico. De la definición de operador hermítico y realizando cálculos, obtenemos la siguiente condición:

$$\langle f|\mathcal{L}|g \rangle - \langle g|\mathcal{L}|f \rangle^* = \left[ p(x) \left( f^*(x) \frac{dg(x)}{dx} - g(x) \frac{df^*(x)}{dx} \right) \right]_a^b = 0. \quad (2.3.4)$$

En lo sucesivo consideraremos las condiciones de contorno mixtas:

$$\begin{cases} \alpha_1 f(a) + \alpha_2 f'(a) = 0. \\ \beta_1 g(b) + \beta_2 g'(b) = 0. \end{cases} \quad (2.3.5)$$

Donde  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  son constantes reales, así como  $\beta_1$  y  $\beta_2$ . Por lo tanto, comprobemos que verifican la condición (2.3.4). Tomando el complejo conjugado de la primera ecuación, construimos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \alpha_1 f^*(a) + \alpha_2 f'^*(a) = 0. \\ \beta_1 g(a) + \beta_2 g'(a) = 0. \end{cases} \quad (2.3.6)$$

Para que la solución al sistema se diferente a la trivial  $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$  se debe cumplir que:

$$\begin{vmatrix} f_1^*(a) & f'^*(a) \\ g(a) & g'(a) \end{vmatrix} = f_1^*(a)g'(a) - f'^*(a)g(a) = 0. \quad (2.3.7)$$

De forma análoga se procede para  $x = b$ :

$$f_1^*(b)g'(b) - f'^*(b)g(b) = 0. \quad (2.3.8)$$

Por lo tanto, se observa de forma inmediata que (2.3.7) y (2.3.8) verifican la condición de hermiticidad (2.3.4). Las condiciones de contorno de Sturm-Liouville son aquellas que hacen que el operador  $\mathcal{L}$  sea hermítico. Definimos, entonces, el problema de Sturm-Livouille, como el problema de condiciones de contorno aplicado a la ecuación de Sturm-Livouille.

La principal razón para analizar el problema de Sturm-Livouille es la gran diversidad de ecuaciones diferenciales de segundo orden y de interés físico que se puede escribir en forma de dicha ecuación. Por ejemplo, la ecuación de Schrödinger:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \right] \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0. \quad (2.3.9)$$

que se corresponde al problema de Sturm-Livouille en el que  $p(x) = w(x) = 1$ ,  $q(x) = -2mV(x)/\hbar^2$  y  $\lambda = 2mE/\hbar^2$ .

### 2.3.1. Función de Green asociada al operador de Sturm-Livouille

Consideremos ahora, el problema de Sturm-Livouille inhomogéneo:

$$\frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{dy(x)}{dx} \right) + q(x)y(x) + \lambda w(x)y(x) = f(x). \quad x \in [a, b]. \quad (2.3.10)$$

En función del operador de Sturm-Livouille  $\mathcal{L}$ , podemos escribir la expresión anterior de la siguiente manera:

$$(\mathcal{L} + \lambda)y(x) = \frac{f(x)}{w(x)}, \quad x \in [a, b]. \quad (2.3.11)$$

donde  $\mathcal{L}$  está dado en (2.3.1). Consideraremos las condiciones de contorno mixtas, anteriormente introducidas:

$$\begin{cases} \alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) = 0. \\ \beta_1 y(b) + \beta_2 y'(b) = 0. \end{cases} \quad (2.3.12)$$

Entonces la función de Green asociada al problema, viene definida por la ecuación:

$$(\mathcal{L} + \lambda)G(x, x') = \frac{\delta(x - x')}{w(x)}. \quad a < x' < b. \quad (2.3.13)$$

Además, la función  $G(x, x')$  satisface las condiciones de contorno (2.3.12)

$$\begin{cases} \alpha_1 G(a, x') + \alpha_2 \partial_{x'} G(x, x')|_{x=a} = 0. \\ \beta_1 G(b, x') + \beta_2 \partial_{x'} G(x, x')|_{x=b} = 0. \end{cases} \quad (2.3.14)$$

A continuación, consideremos dos propiedades fundamentales de la función de Green, relacionadas con la continuidad de la función y su primera derivada.

**Teorema 2.3.1** *La función de Green  $G(x, x')$  es continua para todo  $x \in [a, b]$ , y en particular para  $x = x'$ .*

Aunque no nos centraremos en demostrar este Teorema, si merece la pena considerar la demostración del siguiente resultado.

**Teorema 2.3.2** *La derivada parcial de la función de Green  $G(x, x')$  respecto de  $x$  es continua para todo  $x \in [a, b]$ , excepto para  $x = x'$ , donde se tiene que*

$$G_x(x'_+, x') - G_x(x'_-, x') = \frac{1}{p(x')}.$$

**Demostración** Analicemos la continuidad de la función de Green en un punto arbitrario  $x_0$ . Integrando (2.3.10) en  $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$  tal que  $\epsilon > 0$ :

$$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \frac{\partial}{\partial x} \left[ p(x) \frac{\partial}{\partial x} G(x, x') \right] + q(x)G(x, x') + \lambda w(x)G(x, x') dx = \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \delta(x - x') dx.$$

Integrando el primer término:

$$\left[ p(x) \frac{\partial}{\partial x} G(x, x') \right]_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} + \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} q(x)G(x, x') + \lambda w(x)G(x, x') dx = \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \delta(x - x') dx.$$

Se tienen dos casos:

- $x_0 \neq x'$ . Si tomamos el límite de  $\epsilon \rightarrow 0$ :

$$p(x_0) [G_x(x_0^+, x') - G_x(x_0^-, x')] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} p(x_0) \left[ \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \delta(x - x') dx \right] = 0.$$

En consecuencia la función  $G_x(x', x')$  es continua en  $x_0 \neq x'$ .

- $x_0 = x'$ . En este caso se tiene que:

$$p(x_0) [G_x(x_0^+, x') - G_x(x_0^-, x')] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} p(x_0) \left[ \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \delta(x - x') dx \right] = \frac{1}{p(x')}.$$

En consecuencia la función  $G_x(x', x')$  es discontinua en  $x_0 = x'$ .

Ya estamos en disposición de construir la función de Green asociada al problema de Sturm-Livouille. A este fin, escribimos la función de Green de la siguiente forma:

$$G(x, x') = \begin{cases} G_1(x, x') & \text{si } x \leq x'. \\ G_2(x, x') & \text{si } x \geq x'. \end{cases} \quad (2.3.15)$$

Donde la función  $G_1(x, x')$  es la función de Green a la izquierda y  $G_2(x, x')$  es la función de Green a la derecha, como se muestra en la Figura 2.3.1. La continuidad de la función de Green implica que  $G_1(x', x') = G_2(x', x')$ . De la definición de ambas funciones, se deduce que verifican:

$$\begin{aligned} (\mathcal{L} + \lambda)G_1(x, x') &= 0, & x \leq x'. \\ (\mathcal{L} + \lambda)G_2(x, x') &= 0, & x \geq x'. \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

Por lo tanto, ambas funciones definen la función de Green en todo el espacio menos en  $x = x'$ . Por lo tanto, podemos escribir:

$$G(x, x') = \begin{cases} c_1(x')y_1(x) & \text{si } x < x'. \\ c_2(x')y_2(x) & \text{si } x > x'. \end{cases} \quad (2.3.17)$$

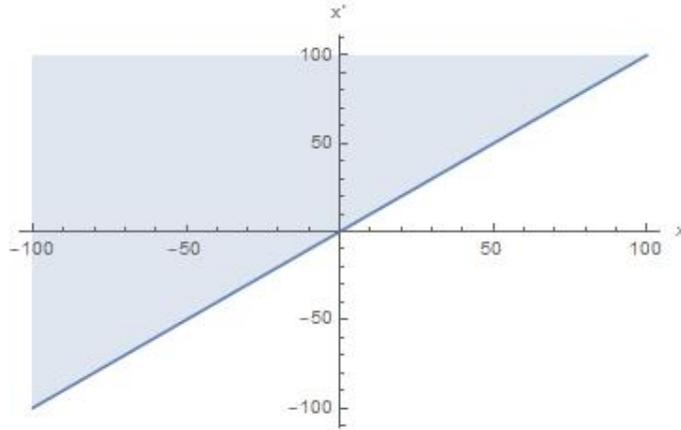


Figura 2.1: La función  $G_1(x, x')$  esta definida en el área sombreada. Y la función  $G_2(x, x')$  esta definida en el área no sombreada.

Donde  $y_1(x)$  y  $y_2(x)$  son soluciones a la ecuación homogénea (2.3.2). Por un lado  $y_1(x)$  verifica la condición de contorno en  $a$  y por otro lado  $y_2(x)$  verifica la condición de contorno en  $b$ . Para ver lo que ocurre en  $x = x'$  utilizaremos la propiedad de continuidad de la función de Green y la discontinuidad de la primera derivada. Por lo tanto:

$$\begin{cases} c_1(x')y_1(x') - c_2(x')y_2(x') = 0. \\ c_2(x')y_2'(x') - c_1(x')y_1'(x') = 1/p(x'). \end{cases} \quad (2.3.18)$$

La condición de compatibilidad de este sistema de ecuaciones para las incógnitas  $c_1(x')$  y  $c_2(x')$  establece que el determinante:

$$\begin{vmatrix} y_1(x') & y_2(x') \\ y_1'(x') & y_2'(x') \end{vmatrix} \neq 0 \iff W[y_1, y_2] \neq 0. \quad (2.3.19)$$

Donde  $W[y_1, y_2]$  representa el Wronskiano de las funciones  $y_1(x)$  y  $y_2(x)$ . Resolvemos el sistema de ecuaciones (2.3.18), mediante Cramer:

$$c_1(x') = \frac{\begin{vmatrix} 0 & -y_2(x') \\ -\frac{1}{p(x')} & -y_2'(x') \end{vmatrix}}{W[y_1, -y_2]} = -\frac{y_2(x')}{p(x')W[y_1, -y_2]} = \frac{y_2(x')}{p(x')W[y_1, y_2]}. \quad (2.3.20)$$

$$c_2(x') = \frac{\begin{vmatrix} y_1(x') & 0 \\ y_1'(x') & -\frac{1}{p(x')} \end{vmatrix}}{W[y_1, -y_2]} = -\frac{y_1(x')}{p(x')W[y_1, -y_2]} = \frac{y_1(x')}{p(x')W[y_1, y_2]}. \quad (2.3.21)$$

Por lo tanto, la función de Green se puede expresar:

$$G(x, x') = \begin{cases} G_1(x, x') = \frac{y_2(x')y_1(x)}{p(x')W[y_1, y_2]} & \text{si } a \leq x \leq x' \leq b. \\ G_2(x, x') = \frac{y_1(x')y_2(x)}{p(x')W[y_1, y_2]} & \text{si } a \leq x' \leq x \leq b. \end{cases} \quad (2.3.22)$$

### 2.3.2. Expansión de la función de Green en serie de autofunciones

Veamos ahora que la función de Green se puede expresar, de forma alternativa, mediante un desarrollo en serie de autofunciones. Consideremos las autofunciones del operador  $\mathcal{L}$  de Sturm-Livouille:

$$\mathcal{L}\phi_n(x) = -\mu_n\phi_n(x), \quad (2.3.23)$$

y supongamos que la función de Green se puede expresar en forma de serie convergente:

$$G(x, x') = \sum_n a_n(x')\phi_n(x). \quad (2.3.24)$$

Donde los coeficientes  $a_n(x')$  están por determinar. Recordemos la definición de función de Green dada en (2.3.11).

$$(\mathcal{L} + \lambda)G(x, x') = \frac{\delta(x - x')}{w(x)}. \quad (2.3.25)$$

Teniendo en cuenta la relación de cierre de las autofunciones  $\{\phi_n(x)\}$  se puede demostrar que:

$$\sum_n \frac{1}{|\phi_n(x)|^2} \phi_n(x)\phi_n^*(x') = \frac{\delta(x - x')}{w(x)}. \quad (2.3.26)$$

Un desarrollo más profundo del espacio formado por las autofunciones del operador  $\mathcal{L}$ , de Sturm-Livouille se puede consultar en [2]. Por lo tanto podemos escribir que:

$$(\mathcal{L} + \lambda) \sum_n a_n(x')\phi_n(x) = \sum_n \frac{1}{|\phi_n(x)|^2} \phi_n(x)\phi_n^*(x'), \quad (2.3.27)$$

luego

$$\sum_n a_n(x')(\lambda - \mu_n)\phi_n(x) = \sum_n \frac{1}{|\phi_n(x)|^2} \phi_n(x)\phi_n^*(x'). \quad (2.3.28)$$

Entonces, obtenemos que los coeficientes  $a_n(x')$  son:

$$a_n(x') = \frac{1}{(\lambda - \mu_n)} \frac{\phi_n^*(x')}{|\phi_n(x)|^2}. \quad (2.3.29)$$

Y por lo tanto, la expansión de la función de Green viene dada por:

$$G(x, x') = \sum_n \frac{1}{|\phi_n(x)|^2} \frac{\phi_n(x)\phi_n^*(x')}{(\lambda - \mu_n)}. \quad (2.3.30)$$

## 2.4. Ejemplos prácticos

En esta sección consideraremos una serie de ecuaciones diferenciales ordinarias que resolveremos por el método de funciones de Green, a fin de ilustrar todos los conceptos desarrollados hasta el momento.

**Ejemplo 1** Consideremos el problema de condiciones de contorno:

$$y''(x) - k^2 y(x) = f(x), \quad 0 \leq x \leq l, \quad y(0) = y(l) = 0. \quad (2.4.1)$$

En primer lugar determinamos la función de Green asociada al problema de condiciones de contorno, que viene definida por la ecuación:

$$G''(x, x') - k^2 G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (2.4.2)$$

En primer lugar obtenemos la solución para  $x \neq x'$ , es decir, la solución a la ecuación homogénea.

$$G(x, x') = \begin{cases} G_1(x, x') = A(x')e^{kx} + B(x')e^{-kx} & \text{si } 0 \leq x < x' \leq l. \\ G_2(x, x') = C(x')e^{kx} + D(x')e^{-kx} & \text{si } 0 \leq x' < x \leq l. \end{cases} \quad (2.4.3)$$

La función de Green verifica las siguientes condiciones de contorno:

- La condición  $G(0, x') = 0$  implica que  $B(x') = -A(x')$ .
- La condición  $G(l, x') = 0$  implica que  $D(x') = -C(x')e^{2kl}$ .

Luego, tenemos que:

$$G(x, x') = \begin{cases} G_1(x, x') = A(x')[e^{kx} + e^{-kx}] & \text{si } 0 \leq x \leq x' \leq l. \\ G_2(x, x') = C(x')[e^{kx} - e^{2kl}e^{-kx}] & \text{si } 0 \leq x' \leq x \leq l. \end{cases} \quad (2.4.4)$$

O de forma equivalente, en términos de funciones hiperbólicas:

$$G(x, x') = \begin{cases} G_1(x, x') = \alpha(x') \sinh kx & \text{si } 0 \leq x \leq x' \leq l. \\ G_2(x, x') = \beta(x') e^{kL} \sinh k(x - l) & \text{si } 0 \leq x' \leq x \leq l. \end{cases} \quad (2.4.5)$$

Ahora, consideremos la continuidad de  $G(x, x')$  en  $x = x'$ :

$$\alpha(x') \sinh kx' - \beta(x') e^{kl} \sinh k(x' - l) = 0. \quad (2.4.6)$$

Y la discontinuidad de la derivada que se deduce del Teorema 2.3.2. Integrando la ecuación (2.4.2) entre  $x' - \varepsilon$  y  $x' + \varepsilon$ :

$$\int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} G'''(x, x') - k^2 G'(x, x') dx = \int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} \delta(x - x') dx, \quad (2.4.7)$$

$$[G'(x, x')]_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} - \int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} k^2 G(x, x') dx = \int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} \delta(x - x') dx. \quad (2.4.8)$$

Tomando el límite cuando  $\varepsilon \rightarrow 0$ , obtenemos:

$$\left. \frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \right|_+ - \left. \frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \right|_- = 1, \quad (2.4.9)$$

de donde

$$\beta(x')e^{kl} \cosh kx' - \alpha(x') \cosh kx' = \frac{1}{k}. \quad (2.4.10)$$

Resolviendo el sistema formado por las ecuaciones (2.4.6) y (2.4.10), obtenemos  $\alpha(x')$  y  $\beta(x')$ :

$$\alpha(x') = \frac{\begin{vmatrix} 0 & -e^{kL} \sinh[k(x' - l)] \\ \frac{1}{k} & -\cosh kx' \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sinh kx' & -e^{kL} \sinh[k(x' - l)] \\ -\cosh kx' & -e^{kL} \cosh[k(x' - l)] \end{vmatrix}} = \frac{\sinh[k(x' - l)]}{k \sinh kl}. \quad (2.4.11)$$

Para el cálculo del determinante del denominador se ha tenido en cuenta las relaciones trigonométricas hiperbólicas del ángulo resta.

$$\beta(x') = \frac{\begin{vmatrix} \sinh kx' & 0 \\ -\cosh kx' & \frac{1}{k} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sinh kx' & -e^{kL} \sinh[k(x' - l)] \\ -\cosh kx' & -e^{kL} \cosh[k(x' - l)] \end{vmatrix}} = \frac{\sinh kx'}{e^{kl} k \sinh kl}. \quad (2.4.12)$$

Finalmente, obtenemos la función de Green del problema:

$$G(x, y) = \begin{cases} \frac{\sinh(kx) \sinh[k(x' - l)]}{k \sinh(kl)} & \text{si } 0 \leq x' \leq x \leq l. \\ \frac{\sinh(kx') \sinh[k(x - l)]}{k \sinh(kl)} & \text{si } 0 \leq x \leq x' \leq l. \end{cases} \quad (2.4.13)$$

A continuación, veamos otra expresión para la función de Green dada por la expansión de la función de Green en serie de autofunciones. Considerando el problema de autofunciones y autovalores del operador  $L := \frac{d^2}{dx^2}$ :

$$L[\phi(x)] = -\mu\phi(x). \quad (2.4.14)$$

La solución a la ecuación diferencial:

$$\phi(x) = A \sin(\sqrt{\mu}x) + B \cos(\sqrt{\mu}x). \quad (2.4.15)$$

Imponiendo las condiciones de contorno  $\phi(0) = \phi(l) = 0$  del problema:

- La condición  $\phi(0) = 0$  implica que  $B = 0$ .
- La condición  $\phi(l) = 0$  implica que  $\sin(\sqrt{\mu}l) = 0$ . Por lo tanto:

$$\mu_n = \frac{n^2 \pi^2}{l^2}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.16)$$

Por lo tanto las autofunciones:

$$\phi_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.17)$$

Ahora, consideremos (2.3.30):

$$G(x, x') = \sum_n \frac{1}{|\phi_n(x)|^2} \frac{\phi_n(x)\phi_n^*(x')}{(\lambda - \mu_n)}, \quad (2.4.18)$$

y la condición de normalización:

$$|\phi_n(x)|^2 = \int_0^l \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)^2 dx = \frac{l}{2} - \frac{\sin\left(2\frac{n\pi}{l}l\right)}{4\frac{n\pi}{l}} = \frac{l}{2}. \quad (2.4.19)$$

Finalmente, teniendo en cuenta que para nuestro problema  $\lambda = -k^2$ :

$$G(x, x') = -\frac{2}{l} \sum_n \frac{\sin\left(\frac{n\pi}{l}x'\right) \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)}{k^2 + \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2}. \quad (2.4.20)$$

Por lo tanto, hemos obtenido un expresión equivalente para la función de Green.

**Ejemplo 2** El problema de condiciones de contorno:

$$xy''(x) + y'(x) - \frac{4}{x}y = f(x), \quad 1 \leq x, \quad y(1) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} y \neq \infty. \quad (2.4.21)$$

Consideremos la función de Green asociada al problema de condiciones de contorno, que viene definida por la ecuación:

$$xG'''(x, x') + G'(x, x') - \frac{4}{x}G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (2.4.22)$$

En primer lugar, obtenemos la solución para  $x \neq x'$ , es decir la solución a la ecuación homogénea; la cual se trata de una ecuación diferencial de Euler. Para resolverla ensayemos una solución de la forma  $y(x) = x^m$ . Luego

$$y'(x) = mx^{(m-1)}, \quad y''(x) = m(m-1)x^{(m-2)}.$$

Sustituyendo en la ecuación homogénea, obtenemos que:

$$x^{m-1}(m^2 - 4) = 0. \quad (2.4.23)$$

Y por lo tanto,  $y(x)$  es solución cuando  $m^2 - 4 = 0$ , es decir,  $m \pm 2$ . La solución general se expresa como combinación lineal de las dos soluciones particulares:  $y_2(x) = x^2$  asociada a  $m = +2$  y  $y_{-2}(x) = x^{-2}$  asociada a  $m = -2$ . Por lo tanto la función de Green en  $x \neq x'$  se escribe:

$$G(x, x') = \begin{cases} A(x')x^2 + B(x')x^{-2} & \text{si } 1 \leq x < x'. \\ C(x')x^2 + D(x')x^{-2} & \text{si } 1 \leq x' < x. \end{cases} \quad (2.4.24)$$

La función de Green satisface las condiciones de contorno:

- $G(1, x') = 0$  lo cual implica  $A(x') = -B(x')$ .
- La condición de finitud cuando  $x \rightarrow \infty$ .

$$\lim_{x \rightarrow \infty} G(x, x') = \lim_{x \rightarrow \infty} (C(x')x^2 + D(x')x^{-2}) \neq \infty \implies C(x') = 0. \quad (2.4.25)$$

La función de Green se reduce a:

$$G(x, x') = \begin{cases} G_1(x, x') = A(x') [x^2 - x^{-2}] & \text{si } 1 \leq x \leq x'. \\ G_2(x, x') = D(x')x^{-2} & \text{si } 1 \leq x' \leq x. \end{cases} \quad (2.4.26)$$

Ahora, consideremos la continuidad de  $G(x, x')$  en  $x = x'$ :

$$A(x') [x'^2 - x'^{-2}] = D(x')x'^{-2}. \quad (2.4.27)$$

Integrando la ecuación (2.4.22) entre  $x' - \varepsilon$  y  $x' + \varepsilon$  se deduce la discontinuidad de la derivada:

$$\int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} xG''(x, x') + G'(x, x') - \frac{4}{x}G(x, x') dx = \int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} \delta(x - x') dx, \quad (2.4.28)$$

$$[xG'(x, x')]_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} + \int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} \frac{4}{x}G(x, x') dx = \int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} \delta(x - x') dx. \quad (2.4.29)$$

Tomando el limite cuando  $\varepsilon \rightarrow 0$ :

$$\left. \frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \right|_+ - \left. \frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \right|_- = \frac{1}{x'}. \quad (2.4.30)$$

Se obtiene entonces que:

$$A(x') [x'^2 - x'^{-2}] + 2D(x')x'^{-2} = -1. \quad (2.4.31)$$

De (2.4.27) y (2.4.31) se obtiene que:

$$D(x') = -\frac{x'^2}{4}, \quad A(x') = -\frac{1}{2(x'^2 + x'^2)}. \quad (2.4.32)$$

La función de Green resulta entonces:

$$G(x, x') = \begin{cases} -\frac{1}{2(x'^2 + x'^2)} [x^2 - x^{-2}], & \text{si } 1 \leq x \leq x'. \\ -\frac{x'^2}{4}x^{-2}, & \text{si } 1 \leq x' \leq x. \end{cases} \quad (2.4.33)$$

## 2.5. Métodos para la determinación de la función de Green

Para determinar la función de Green asociada a una ecuación diferencial dada; hay dos métodos ampliamente utilizados: el método de separación de variables de Bernouilli y el método de la transformada integral. También, cabe destacar los métodos numéricos que se pueden implementar computacionalmente. En los capítulos siguientes procederemos a determinar la función de Green asociada a diferentes ecuaciones que tienen gran interés físico.

- *La ecuación de oscilador armónico:*  $\frac{d^2u(t)}{dt^2} + \omega_0^2u(t) = 0.$

- *La ecuación de Laplace:*  $\nabla^2u = 0.$

- *La ecuación de Poisson:*  $\nabla^2u = -\rho/\varepsilon.$

- *La ecuación de Helmholtz:*  $\nabla^2u \pm k^2u = 0.$

- *La ecuación de ondas:*

$$\frac{\partial^2u}{\partial t^2} - c^2\nabla^2u = 0. \quad (2.5.1)$$

- *La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:*

$$[E - H(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.5.2)$$

- *La ecuación de Schrödinger*

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi. \quad (2.5.3)$$

- *La ecuación de Klein-Gordon*  $(\square + m^2)\psi = 0.$

- *La ecuación de Dirac*  $(i\rlap{-}\not{\partial} - m)\psi(\mathbf{x}) = \delta^{(4)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}).$

### 2.5.1. Método de separación de variables de Bernouilli

El método es de gran utilidad y fundamental en el estudio de las soluciones para ciertas ecuaciones en derivadas parciales, las cuales tienen gran interés en física. Sin embargo, este método no es aplicable a todas las ecuaciones en derivadas parciales. En este sentido, aquellas ecuaciones en las que este método es aplicable se denominan separables. Para el caso de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales en términos del operador lineal:

$$\mathcal{L} := \left( \frac{\partial}{\partial x_0} \dots \frac{\partial^n}{\partial x_i^n}; x_0 \dots x_i \right). \quad (2.5.4)$$

La ecuación diferencial se puede escribir:

$$\mathcal{L}[u] = F, \quad (2.5.5)$$

donde  $F$  es una función conocida y  $u$  es la función que se desea determinar. El problema de determinar la solución a una ecuación en derivadas parciales inhomogénea  $\mathcal{L}[u] = F$  mediante el método de las funciones de Green, es análogo al caso de ecuaciones diferenciales ordinarias.

**Teorema 2.5.1** *Sea  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  una función de  $n$ -variable continua en un cierto dominio  $\mathcal{D}$ . Entonces la solución  $u(x_1, x_2, \dots, x_n)$  a la ecuación  $\mathcal{L}[u] = F$ , viene determinada por:*

$$u(x_1, x_2, \dots, x_n) = \int_{\mathcal{D}} G(x_1, x_2, \dots, x_n; x'_1, x'_2, \dots, x'_n) f(x'_1, x'_2, \dots, x'_n) dx'_1 dx'_2 \dots dx'_n. \quad (2.5.6)$$

## 2.5.2. Método de la transformada integral

Las transformaciones integrales son de gran utilidad en el estudio de ecuaciones diferenciales, y por lo tanto en la determinación de la función de Green asociada. Consideremos una función  $f(x)$  y su función transformada  $F(y)$  respecto de la variable  $s$  :

$$F(y) = \int_a^b k(x, y) f(x) dx, \quad (2.5.7)$$

donde  $k(x, y)$  es el *kernel* de la transformada. Mediante la aplicación de esta transformación lineal, la ecuación diferencial se reduce a una ecuación algebraica que nos proporciona  $F(y)$ . Finalmente, mediante la transformada integral inversa obtenemos la solución  $f(x)$ . Algunos ejemplos de transformadas integrales.

### Transformada de Laplace

$$\mathcal{L}\{f(t)\} \equiv F(s) = \int_0^{\infty} f(t) e^{-st} dt. \quad (2.5.8)$$

La transformada inversa:

$$\mathcal{L}^{-1}\{F(s)\} \equiv f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{t-i\infty}^{t+i\infty} f(t) e^{st} dt. \quad (2.5.9)$$

### Transformada de Hankel de orden $n$

$$\mathcal{H}_n\{F(x)\} = F_n(\sigma) = \int_0^{\infty} x f(x) J_n(\sigma x) dx. \quad (2.5.10)$$

La transformada inversa:

$$\mathcal{H}_n^{-1}\{F_n(\sigma)\} = f(x) = \int_0^{\infty} x F_n J_n(\sigma x) d\sigma. \quad (2.5.11)$$

donde  $J_n(\sigma x)$  son las funciones de *Bessel* de orden  $n$ .

## Transformada de Fourier

$$\mathcal{F}\{f(x)\} \equiv F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx} dx. \quad (2.5.12)$$

La transformada inversa:

$$\mathcal{F}^{-1}\{f(x)\} \equiv F(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k)e^{ikx} dk. \quad (2.5.13)$$

En esta sección solamente hemos incluido la definición de las principales transformadas, sin incluir ninguna de sus propiedades. A lo largo de los capítulos siguientes haremos uso de algunas propiedades básicas de la transformada de Fourier y de Laplace que no expondremos.

Dada la importancia de la transformada de Fourier en los desarrollos posteriores es necesario analizarla en mayor profundidad. A este fin, consideraremos una serie de Teoremas, que aunque no demostraremos rigurosamente si que expondremos las líneas generales de su demostración. De acuerdo con (2.5.12) la integral que se requiere evaluar a la hora de calcular la transformada es la siguiente integral compleja:

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx} dx. \quad (2.5.14)$$

Vamos ha encontrar situaciones en las que dicha integral no esta definida, puesto que la función  $f(x)$  de variable real presenta singularidades en los puntos  $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ . En este caso podemos definir el *valor principal de Cauchy*, si existe y es finito, mediante el siguiente límite:

$$V.P \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{x_0-\epsilon} f(x) dx + \int_{x_0+\epsilon}^{x_1-\epsilon} f(x) dx + \dots + \int_{x_n+\epsilon}^{\infty} \right\}. \quad (2.5.15)$$

A continuación consideremos el siguiente Teorema que va a ser utilizado en desarrollos posteriores.

**Teorema 2.5.2** (Jordan) *Sea  $f(z)$  una función compleja de variable compleja  $z$ , analítica en el disco punteado  $D(z_0; \delta) - \{z_0\}$ , con un polo simple  $z_0$ . Sea  $\epsilon < \delta$  y sea  $\gamma_\epsilon$  un arco circular en  $z_0$ , de radio  $\epsilon$  y ángulo  $\alpha$ , orientado en sentido antihorario, como el representado en la Figura 2.2. Entonces:*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\gamma_\epsilon} f(z)dz = \alpha i \text{Res}(f(z); z_0). \quad (2.5.16)$$

donde  $\text{Res}(f(z); z_0)$  es el residuo de la función  $f(z)$  en el polo  $z_0$ .

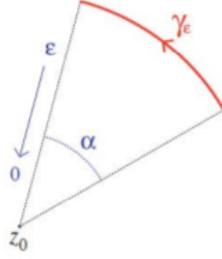


Figura 2.2: Contorno de integración entorno al polo simple  $z_0$ .

**Demostración** Sabemos que en el interior del disco centrado en  $z_0$  y de radio  $\delta$  podemos escribir:

$$f(z) = \frac{b_1}{(z - z_0)} + g(z).$$

donde  $g(z)$  es analítica en el disco  $D(z_0; \delta) - \{z_0\}$  y  $b_1 = \text{Res}(f(z); z_0)$ . Por lo tanto:

$$\int_{\gamma_\epsilon} f(z) dz = \int_{\gamma_\epsilon} \frac{b_1}{(z - z_0)} dz + \int_{\gamma_\epsilon} g(z) dz. \quad (2.5.17)$$

El arco  $\gamma_\epsilon$  se puede parametrizar por  $\gamma_\epsilon(\theta) = z_0 + \epsilon e^{i\theta}$  en  $\theta \in [\theta_0, \theta_0 + \alpha]$ . De esta manera, podemos escribir:

$$\int_{\gamma_\epsilon} \frac{b_1}{(z - z_0)} dz = b_1 \int_{\theta_0}^{\theta_0 + \alpha} \frac{1}{\epsilon e^{i\theta}} \epsilon i e^{i\theta} = i\alpha b_1.$$

Por otro lado:

$$\left| \int_{\gamma_\epsilon} g(z) dz \right| \leq \int_{\gamma_\epsilon} |g(z)| d|z| \leq M \int_{\gamma_\epsilon} d|z| = ML(\gamma_\epsilon),$$

donde  $M$  es el valor máximo de  $|g(z)|$  y  $L(\gamma_\epsilon) = \epsilon\alpha$ . Se deduce entonces que la integral es nula cuando  $\epsilon \rightarrow 0$ .

Tras este Teorema ya estamos en disposición de introducir el resultado fundamental de esta sección. Recordemos que si la función a integrar en (2.5.14) posee polos que no caigan sobre el eje real, es decir, polos complejos entonces la transformada de Fourier se calcula mediante la aplicación del teorema de los residuos. En caso contrario debemos recurrir al concepto de *valor principal de Cauchy*.

**Teorema 2.5.3** Sea  $f(z)$  una función de la forma  $f(z) = e^{\pm ikz} g(z)$  con  $k > 0$ , que además es meromorfa en el plano complejo y que admite polos simples en el eje real. Además, existe dos constantes  $r > 0$  y  $M > 0$  tales que para todo número complejo  $z$  con  $\text{Im}(z) \geq 0$  y  $|z| \geq r$ , tenemos que:

$$|g(z)| \leq \frac{M}{|z|}. \quad (2.5.18)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} & V.P \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikz} g(z) dx = \\ & = 2\pi i \sum \{Res(f(z) \text{ en semiplano superior})\} + \pi i \sum \{Res(f(z) \text{ en el eje real})\}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & V.P \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikz} g(z) dx = \\ & = -2\pi i \sum \{Res f(z) \text{ en semiplano inferior}\} - \pi i \sum \{Res(f(z) \text{ en el eje real})\}. \end{aligned}$$

A continuación, daremos la idea general de la demostración de este resultado. Sin embargo, la demostración formal se puede encontrar en [6].

**Demostración** La demostración del resultados para el primer caso se basa en considerar la integral a lo largo del contorno que se muestra en la Figura 2.3. La integral sobre el contorno semicircular  $\gamma_R$  de radio  $R$  es igual a  $2\pi$  multiplicado por los residuos sobre el semiplano superior. Dicha integral tiende a cero cuando  $R \rightarrow \infty$  (el motivo de la acotación). Seguidamente, se deben analizar los semicirculos que rodean a los polos reales mediante el Teorema de Jordan, es decir, cuando  $\epsilon \rightarrow 0$ . De este teorema se obtiene el sumando asociado a los polos sobre el eje real. En el segundo caso se considera un contorno análogo pero en el semiplano inferior y se realizan las mismas consideraciones.

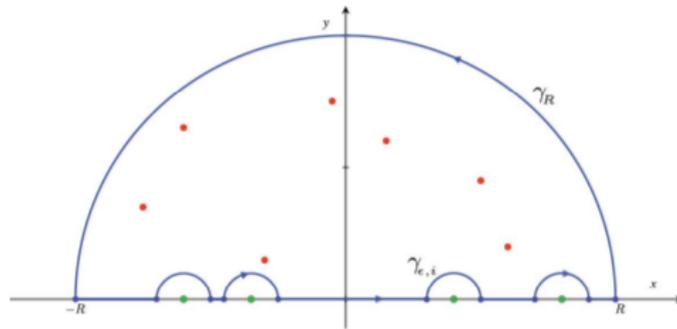


Figura 2.3: Contorno de integración considerado en la demostación del Teorema 2.5.3. En verde se muestran los polos sobre el eje real.

— “Piece, or part, of the whole of nature is always merely an approximation to the complete truth, or the complete truth so far as we know it. In fact, everything we know is only some kind of approximation because we know that we do not know all the laws as yet.”

— Richard P. Feynman —

# 3

## Funciones de Green en física clásica

En este capítulo vamos a comenzar con el estudio de diversos sistemas físicos mediante el método de las funciones de Green. Nos restringiremos al estudio de sistemas clásicos de importancia en Física. En primer lugar, comenzaremos con el estudio del que quizá, sea el ejemplo más importante, el del oscilador armónico simple. Seguidamente, en consonancia con el anterior, se estudiará el oscilador armónico amortiguado. Una introducción a estos problemas se presenta en [9]. Finalmente, entraremos en contacto con las ecuaciones en derivadas parciales a través de la ecuación del calor unidimensional y la ecuación de ondas unidimensional. Un desarrollo de dichos problema en otros sistemas de coordenadas y bajo otras condiciones de contorno se encuentra en [10].

### 3.1. Oscilador armónico

Comencemos considerando la Lagrangiana del sistema:

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2, \quad (3.1.1)$$

donde  $k$  es una constante  $k > 0$ . A partir de las ecuaciones de Euler-Lagrange obtenemos la siguiente ecuación del movimiento:

$$m \frac{d^2x(t)}{dt^2} + kx(t) = 0. \quad (3.1.2)$$

Teniendo en cuenta que la frecuencia de oscilaciones libres es  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ , se puede reescribir:

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \omega_0^2 x(t) = 0. \quad (3.1.3)$$

Como es sabido, la solución a (3.1.3) se puede escribir

$$x(t) = A \cos(\omega_0 t) + B \sin(\omega_0 t), \quad (3.1.4)$$

donde las constantes  $A$  y  $B$  se determinan a partir de las condiciones iniciales.

$$\begin{cases} x(t=0) = x_0 = A. \\ v(t=0) = v_0 = B\omega_0. \end{cases} \quad (3.1.5)$$

De esta forma se tiene que la solución:

$$x(t) = x_0 \cos(\omega_0 t) + \frac{v_0}{\omega_0} \sin(\omega_0 t). \quad (3.1.6)$$

Sin embargo, el problema que nos interesa es el de las oscilaciones de una partícula sometida a una fuerza externa  $F(t)$ . Por lo tanto, la ecuación del movimiento:

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \omega_0^2 x(t) = \frac{F(t)}{m}. \quad (3.1.7)$$

Para determinar la función de Green asociada a la ecuación del movimiento (3.1.7) procederemos mediante el método de la transformada de Fourier. La función de Green viene definida como la solución a la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial^2 G(t, t')}{\partial t^2} + \omega_0^2 G(t, t') = \frac{1}{m} \delta(t - t'). \quad (3.1.8)$$

Considerando la transformada de Fourier de la función de Green respecto de la variable  $t$ .

$$\tilde{G}(\kappa, t') = \int_{-\infty}^{\infty} G(t, t') e^{-i\kappa t} dt, \quad (3.1.9)$$

y su transformada inversa:

$$G(t, t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}(\kappa, t') e^{i\kappa t} d\kappa. \quad (3.1.10)$$

Aplicando la transformación de Fourier a la ecuación (3.1.8) obtenemos la siguiente ecuación algebraica:

$$[-\kappa^2 + \omega_0^2] \tilde{G}(\kappa, t') = \frac{e^{-i\kappa t'}}{m}. \quad (3.1.11)$$

La resolución de esta ecuación nos proporciona una expresión para  $\tilde{G}(\kappa)$ :

$$\tilde{G}(\kappa, t') = \frac{e^{-i\kappa t'}}{m(\omega_0^2 - \kappa^2)}. \quad (3.1.12)$$

En consecuencia, podemos obtener la función de Green mediante la transformada inversa de Fourier de (3.1.12):

$$G(t, t') = -\frac{1}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa - \omega_0^2)} d\kappa. \quad (3.1.13)$$

El integrando de (3.1.12) es una función que presenta dos polos simples  $\kappa = \pm\omega_0$  que se localizan sobre el eje real del  $\kappa$ -plano complejo, tal y como se representa en la Figura 3.1. Por lo tanto estamos en condición de aplicar el Teorema 2.5.3, basado en el teorema de los residuos.

$$G(t, t') = -\frac{1}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa - \omega_0)(\kappa + \omega_0)} d\kappa = \quad (3.1.14)$$

$$-\frac{1}{2\pi m} V.P \oint_C \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa - \omega_0)(\kappa + \omega_0)} d\kappa = -\frac{\pi i}{2\pi m} (Res[\omega_0] + Res[-\omega_0]).$$

Es decir, la integral debe entenderse como un *valor principal de Cauchy*.

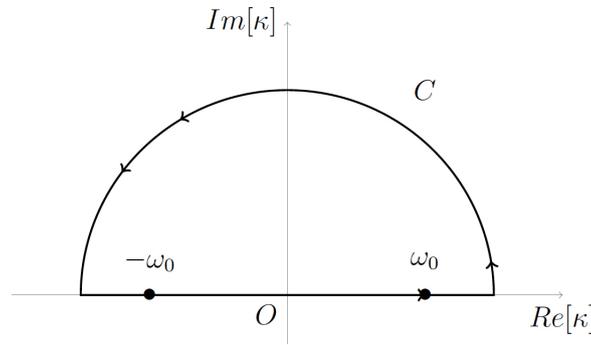


Figura 3.1: Contorno de integración para el oscilador armónico simple

Los residuos asociados al polo de primer orden  $\kappa = \omega_0$ :

$$Res[\omega_0] = \lim_{\kappa \rightarrow \omega_0} \left[ (\kappa - \omega_0) \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa - \omega_0)(\kappa + \omega_0)} \right] = \lim_{\kappa \rightarrow \omega_0} \left[ \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa + \omega_0)} \right] = \frac{e^{i\omega_0(t-t')}}{2\omega_0}.$$

De forma análoga se procede con el polo  $\kappa = -\omega_0$ :

$$Res[-\omega_0] = \lim_{\kappa \rightarrow -\omega_0} \left[ (\kappa + \omega_0) \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa - \omega_0)(\kappa + \omega_0)} \right] = \lim_{\kappa \rightarrow -\omega_0} \left[ \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa - \omega_0)} \right] = -\frac{e^{-i\omega_0(t-t')}}{2\omega_0}.$$

Recordemos, que de acuerdo con el Teorema 2.5.3 la integral es válida cuando  $t - t' > 0$  y debemos considerar los polos en el semiplano superior y eje real. En caso de considerar el caso  $t' - t > 0$ , debemos tener en cuenta los polos sobre el semiplano inferior y el eje real. Nosotros consideraremos el caso primero, pues como ya veremos es el único físicamente aceptable. Recordemos que dado que los polos se localizan sobre el eje real debemos considerar la definición de *valor principal de Cauchy*. Así pues, teniendo en cuenta la fórmula de Euler, obtenemos:

$$G(t, t') = \frac{\sin[\omega(t - t')]}{2m\omega_0} H(t - t'), \quad (3.1.15)$$

donde  $H(t - t')$  es la función de Heaviside que nos indica que la función de Green está definida cuando  $t - t' > 0$ . Puesto que esta es la primera aplicación que se presenta, y unido a la importancia que tiene el oscilador armónico en Física vamos a analizarlo en mayor profundidad. A continuación, veamos que esta solución es físicamente aceptable. Del capítulo anterior se infiere que la solución particular a la ecuación inhomogénea que incluye el término de forzaje  $F(t)$ , nos proporciona la ecuación del movimiento :

$$x(t) = \int_{t'_i}^{t'_f} G(t, t') \frac{F(t')}{m} dt'. \quad (3.1.16)$$

Donde  $t'_i$  y  $t'_f$  representan, respectivamente, el tiempo inicial y final de actuación del término de forzaje. Por lo tanto, se deduce que el efecto de la fuente  $F(t')$  se observa sobre el movimiento de la partícula ( $x(t)$ ) en un instante después  $t > t'$ . La función de Green, entonces, depende del tiempo  $t$  de observación del movimiento de la partícula y del tiempo  $t'$  en el que actúa la fuente. El principio de **causalidad** exige que el efecto se debe observar después de la causa. Por lo tanto, para que la función de Green sea físicamente aceptable debe satisfacer las siguientes condiciones:

$$G(t, t') = 0, \quad \frac{\partial G(t, t')}{\partial t} = 0, \quad \forall t < t'. \quad (3.1.17)$$

En particular, para el instante  $t = 0$  (condición inicial) se tiene que  $G(0, t') = 0$ . La fuente se puede expresar como una superposición continua de forzajes elementales que actúan en cada instante, y de esta forma el efecto que produce sobre el movimiento de la partícula se puede expresar como la superposición de los efectos elementales producidos en cada instante. Esto queda reflejado en la ecuación (3.1.16). A continuación, a pesar de lo abstracto de las funciones de Green merece la pena considerar la representación de la función hallada en (3.1.15), en la que se puede observar las principales características mencionadas. Para ello véase la Figura 3.2

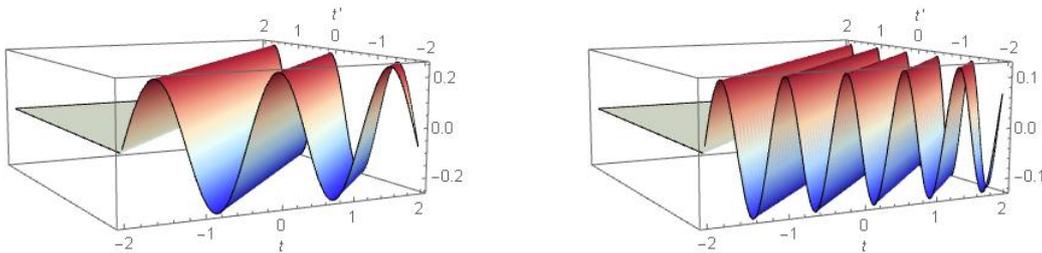


Figura 3.2: Función de Green del oscilador armónico (3.1.15) para una masa unitaria y frecuencias  $\omega_0 = 4$  a la izquierda y frecuencias  $\omega_0 = 8$  a la derecha.

## 3.2. Oscilador armónico amortiguado

A continuación vamos a considerar el oscilador armónico amortiguado bajo una fuerza proporcional a la velocidad  $F_{am} = -\beta\dot{x}$ . El problema es continuación del anterior, en el que ahora incluimos un término de amortiguamiento. Por lo tanto, la ecuación del movimiento para las oscilaciones amortiguadas de una partícula material de masa  $m$ , bajo la acción de una fuerza genérica  $F(t)$ , resulta:

$$m \frac{d^2x(t)}{dt^2} + \beta \frac{dx(t)}{dt} + kx(t) = F(t). \quad (3.2.1)$$

Definiendo el parámetro de amortiguamiento  $\gamma$  y considerando la frecuencia de las oscilaciones libres  $\omega_0$ :

$$2\gamma = \frac{\beta}{m}, \quad \omega_0^2 = \frac{k}{m}. \quad (3.2.2)$$

La ecuación (3.2.1) se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + 2\gamma \frac{dx(t)}{dt} + \omega_0^2 x(t) = \frac{1}{m} F(t). \quad (3.2.3)$$

Por lo tanto, podemos definir la función de Green asociada mediante la siguiente ecuación diferencial en derivadas parciales:

$$\frac{\partial^2 G(t, t')}{\partial t^2} + 2\gamma \frac{\partial G(t, t')}{\partial t} + \omega_0^2 G(t, t') = \frac{1}{m} \delta(t - t'). \quad (3.2.4)$$

Para la determinación de la función de Green procederemos como en el apartado anterior, mediante el método de la transformada de Fourier. A este fin, consideremos de nuevo la transformada de Fourier de la función de Green:

$$\tilde{G}(\kappa, t') = \int_{-\infty}^{\infty} G(t, t') e^{-i\kappa t} dt. \quad (3.2.5)$$

Considerando la transformada de Fourier de la ecuación (3.2.4) y las propiedades de la transformada de Fourier, obtenemos:

$$[-\kappa^2 + 2i\gamma\kappa + \omega_0^2] \tilde{G}(\kappa, t') = \frac{e^{-i\kappa t'}}{m}. \quad (3.2.6)$$

Luego:

$$\tilde{G}(\kappa, t') = -\frac{1}{m} \frac{e^{-i\kappa(t')}}{\kappa^2 - 2i\gamma\kappa - \omega_0^2}. \quad (3.2.7)$$

La función  $G(t, t')$  se obtiene extrayendo la transformada de Fourier inversa:

$$G(t, t') = \frac{-1}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{\kappa^2 + 2i\gamma\kappa - \omega_0^2} d\kappa, \quad (3.2.8)$$

$$= \frac{-1}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\kappa(t-t')} d\kappa}{(\kappa - \lambda_1)(\kappa - \lambda_2)}.$$

Donde

$$\lambda_1 = i\gamma + \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}. \quad (3.2.9)$$

$$\lambda_2 = i\gamma - \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}. \quad (3.2.10)$$

Para la resolución de la integral recurriremos, de nuevo, al teorema 2.5.2 o de forma equivalente el teorema de los residuos, pues no existen polos sobre el eje real. Para ello procederemos al cálculo de los residuos de los polos simples  $\kappa = \lambda_1, \lambda_2$ . Ambos polos se localizan en el semiplano superior, como se muestra en la Figura 3.3.

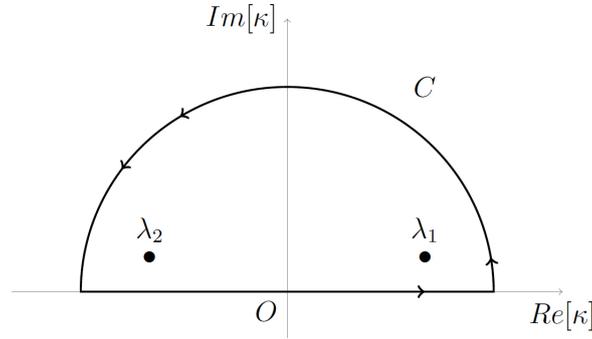


Figura 3.3: Contorno de integración para el oscilador armónico amortiguado.

Por lo tanto, los residuos son:

$$Res \left[ \tilde{G}(\kappa, t'); \lambda_1 \right] = \frac{-1}{m} \lim_{\kappa \rightarrow \lambda_1} \left[ (\kappa - \lambda_1) \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa - \lambda_1)(\kappa - \lambda_2)} \right] = \frac{-1}{m} \frac{e^{i\lambda_1(t-t')}}{\lambda_1 - \lambda_2}.$$

De forma análoga se procede con el polo  $\kappa = \lambda_2$ :

$$Res \left[ \tilde{G}(\kappa, t'); \lambda_2 \right] = \frac{-1}{m} \lim_{\kappa \rightarrow \lambda_2} \left[ (\kappa - \lambda_2) \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa - \lambda_1)(\kappa - \lambda_2)} \right] = \frac{1}{m} \frac{e^{i\lambda_2(t-t')}}{\lambda_1 - \lambda_2}.$$

Se distinguen, ahora, varios casos.

**Subamortiguado** ( $\gamma < \omega_0$ ) En este caso como se muestra en la figura 3.3 los polos se localizan de forma simétrica sobre el semiplano superior.

$$G(t, t') = \frac{-i}{m} \left[ \frac{e^{i\lambda_1(t-t')}}{\lambda_1 - \lambda_2} - \frac{e^{i\lambda_2(t-t')}}{\lambda_1 - \lambda_2} \right], \quad \forall t > t'. \quad (3.2.11)$$

Sustituyendo la expresión de  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ , y considerando la definición del seno, podemos escribir:

$$G(t, t') = \frac{e^{-\gamma(t-t')}}{m} \frac{\sin[\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}(t-t')]}{\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}} H(t-t'). \quad (3.2.12)$$

A partir de su representación, que se muestra en la Figura 3.4, se pueden observar sus principales características. Se observa que la amplitud de la función de Green disminuye gradualmente debido al factor exponencial, de igual forma que sucede con su solución. Esto se debe a que la solución particular a la ecuación (3.2.3) se puede expresar como:

$$x(t) = \int_{t'_i}^{t'_f} G(t, t') \frac{F(t')}{m} dt'. \quad (3.2.13)$$

Donde  $t'_i$  y  $t'_f$  representan, respectivamente, el tiempo inicial y final de actuación del término de forzaje. Este comportamiento de oscilaciones que reducen gradualmente su amplitud hasta detenerse es característico del oscilador subamortiguado. También recordar que de acuerdo con el principio de causalidad la función solamente se define para  $t > t'$ .

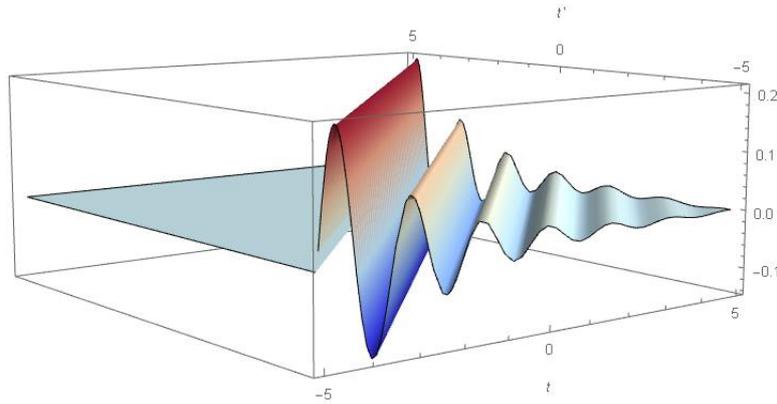


Figura 3.4: Función de Green del oscilador armónico subamortiguado (3.2.12).

### Sobreamortiguado ( $\gamma > \omega_0$ )

De forma análoga al caso anterior pero teniendo en cuenta que  $\gamma > \omega_0$  y utilizando la definición de seno hiperbólico, tenemos que:

$$G(t, t') = \frac{e^{-\gamma(t-t')}}{m} \frac{\sinh[\sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}(t - t')]}{\sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}} H(t - t'). \quad (3.2.14)$$

Su representación gráfica se muestra en la Figura 3.5.

En este caso, se puede observar que la función de Green describe una oscilación, a lo sumo, antes de hacerse cero.

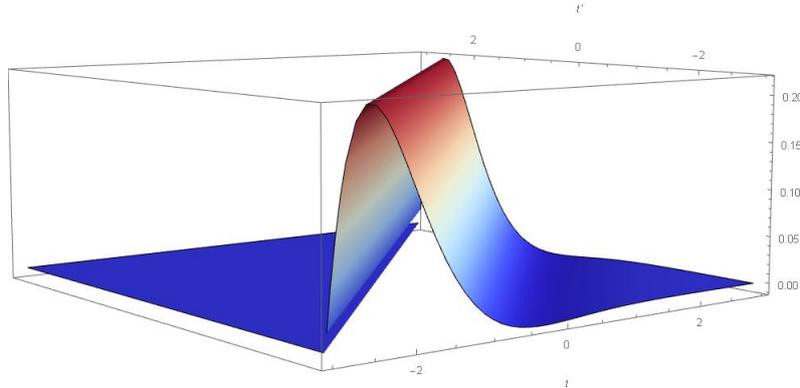


Figura 3.5: Función de Green del oscilador armónico sobreamortiguado (3.2.14).

### Amortiguamiento crítico ( $\gamma = \omega_0$ )

Tenemos un polo de segundo orden  $\lambda = i\gamma$  sobre el eje imaginario. El correspondiente residuo:

$$\text{Res} \left[ \frac{e^{i\kappa(t-t'); i\gamma}}{(\kappa - i\gamma)^2} \right] = \lim_{\kappa \rightarrow i\gamma} \left( \frac{d}{d\kappa} (\kappa - i\gamma)^2 \frac{e^{i\kappa(t-t')}}{(\kappa - i\gamma)^2} \right) = ie^{-\gamma(t-t')}(t - t'). \quad (3.2.15)$$

Por lo tanto, ya podemos obtener la función de Green:

$$G(t, t') = \frac{e^{-\gamma(t-t')}}{m} (t - t') H(t - t'). \quad (3.2.16)$$

Finalmente, consideraremos el representación gráfica de la función de Green para el caso de amortiguamiento crítico, mostrada en la Figura 3.6. La función de Green describe una oscilación antes de hacerse cero.

## 3.3. Ecuación del calor

En primer lugar consideremos la ecuación del calor unidimensional, que nos proporciona  $\varphi(x, t)$ , es decir, la distribución unidimensional de la temperatura a lo largo del tiempo:

$$\frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} - k \frac{\partial^2 \varphi(x, t)}{\partial x^2} = f(x, t). \quad (3.3.1)$$

Donde  $k > 0$  es la conductividad térmica y  $f(x, t)$  el término inhomogéneo que representa una determinada fuente de calor, que está distribuida a lo largo del eje  $x$  y puede variar en el tiempo. Por lo tanto consideraremos las siguientes condiciones.

- La condición de contorno  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \varphi(x, t) \neq \pm\infty$ .

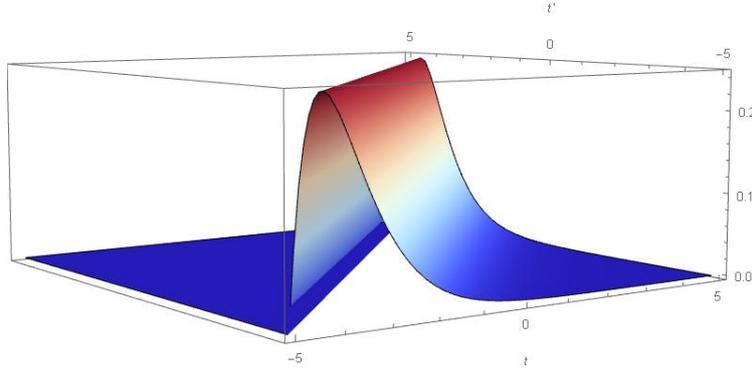


Figura 3.6: Función de Green del oscilador armónico para el amortiguamiento crítico (3.2.16).

- La condición inicial  $u(x, 0) = 0$ .

Por lo tanto estamos considerando la ecuación del calor sobre un dominio infinito, es decir, estamos modelizando la difusión del calor sobre una barra longitudinal de dimensión infinita. La función de Green  $G(x, x'; t, t')$  asociada a esta ecuación diferencial viene determinada por:

$$\frac{\partial G(x, x'; t, t')}{\partial t} - k \frac{\partial^2 G(x, x'; t, t')}{\partial x^2} = \delta(x - x')\delta(t - t'). \quad (3.3.2)$$

A diferencia del caso anterior, tenemos una ecuación diferencial en derivadas parciales, por lo que debemos considerar el término de la delta de Dirac en las variables  $t$  y  $x$ . Las condiciones asociadas al problema son:

- $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} G(x, x'; t, t') \neq \pm\infty$ .
- $G(x, x'; 0, t') = 0$ .

Para determinar la correspondiente función de Green, la manera más sencilla de proceder es recurrir a la transformada de Laplace respecto del tiempo. Recordemos que la transformada de Laplace está definida para  $t > t'$ . Por lo tanto, tenemos que:

$$\bar{G}(x, x'; s, t') = \int_0^\infty G(x, x'; t, t') e^{-st} dt. \quad (3.3.3)$$

Considerando las condición iniciales y tomando la transformada de Laplace de (3.3.2), obtenemos:

$$s\bar{G}(x, x'; s, t') - G(x, x'; 0, t') - k \frac{\partial^2 \bar{G}(x, x'; s, t')}{\partial x^2} = e^{-st'} \delta(x - x'). \quad (3.3.4)$$

La ecuación se puede reescribirse de la siguiente manera:

$$\frac{\partial^2 \bar{G}(x, x'; s, t')}{\partial x^2} - \frac{s}{k} \bar{G}(x, x'; s, t') = -\frac{e^{-st'} \delta(x - x')}{k}. \quad (3.3.5)$$

A continuación procederemos mediante el método de la transformada de Fourier en la variable  $x$ .

$$\tilde{G}(\kappa, x'; s, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{G}(x, x'; s, t') e^{-i\kappa x} dx. \quad (3.3.6)$$

Por lo tanto, tomando la transformada de Fourier de la ecuación (3.3.5):

$$(i\kappa)^2 \tilde{G}(\kappa, x'; s, t') - \frac{s}{k} \tilde{G}(\kappa, x'; s, t') = -\frac{1}{k} e^{-(i\kappa x' + st')}. \quad (3.3.7)$$

Reagrupando términos:

$$\tilde{G}(\kappa, x'; s, t') = \frac{1}{k} \frac{e^{-(i\kappa x' + st')}}{\kappa^2 + \frac{s}{k}}. \quad (3.3.8)$$

Extrayendo su transformada inversa, obtenemos:

$$\bar{G}(x, x'; s, t') = \frac{e^{-st'}}{2\pi k} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\kappa(x-x')}}{\kappa^2 + \frac{s}{k}} d\kappa. \quad (3.3.9)$$

En este problema los polos de primer orden se localizan sobre el eje imaginario  $\lambda_1 = i\sqrt{\frac{s}{k}}$  y  $\lambda_2 = -i\sqrt{\frac{s}{k}}$ . En primer lugar consideremos el residuo del polo localizado sobre el semiplano superior  $\lambda_1 = i\sqrt{\frac{s}{k}}$ , como se muestra en la Figura 3.7.

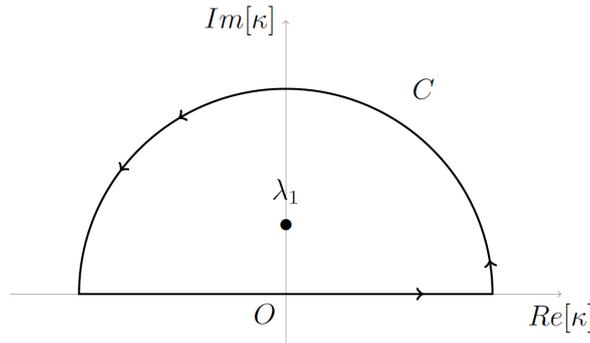


Figura 3.7: Contorno de integración sobre el semiplano superior.

$$\text{Res} \left[ \frac{e^{i\kappa(x-x')}}{\kappa^2 + \frac{s}{k}}; \lambda_1 \right] = \lim_{\kappa \rightarrow \lambda_1} \left[ (\kappa - \lambda_1) \frac{e^{i\kappa(x-x')}}{(\kappa - \lambda_1)(\kappa - \lambda_2)} \right] = \frac{e^{-\sqrt{\frac{s}{k}}(x-x')}}{2i\sqrt{\frac{s}{k}}}.$$

Aplicando el Teorema 2.5.3, obtenemos la función  $\bar{G}(x, x'; s)$  cuando  $x > x'$ :

$$\bar{G}(x, x'; s, t') = \frac{e^{-st'}}{2\pi k} \left[ 2\pi i \frac{e^{-\sqrt{\frac{s}{k}}(x-x')}}{2i\sqrt{\frac{s}{k}}} \right] = \frac{e^{-\sqrt{\frac{s}{k}}(x-x')-st'}}{2k\sqrt{\frac{s}{k}}}, \quad \forall x > x'. \quad (3.3.10)$$

Ahora, consideremos el residuo del polo localizado sobre el semiplano inferior  $\lambda_2 = -i\sqrt{\frac{s}{k}}$ , como se indica en la Figura 3.8.

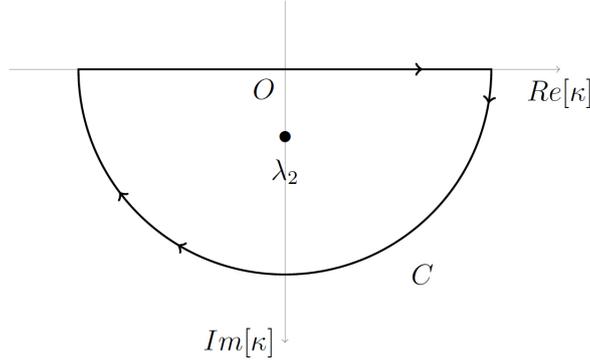


Figura 3.8: Contorno de integración sobre el semiplano inferior.

$$Res \left[ \frac{e^{i\kappa(x-x')}}{\kappa^2 + \frac{s}{k}}; \lambda_2 \right] = \lim_{\kappa \rightarrow \lambda_2} \left[ (\kappa - \lambda_2) \frac{e^{i\kappa(x-x')}}{(\kappa - \lambda_2)(\kappa - \lambda_1)} \right] = \frac{e^{\sqrt{\frac{s}{k}}(x-x')}}{-2i\sqrt{\frac{s}{k}}}$$

De nuevo, aplicamos el Teorema 2.5.3 que nos permite escribir:

$$\bar{G}(x, x'; s, t') = \frac{e^{-st'}}{2\pi k} \left[ -2\pi i \frac{e^{\sqrt{\frac{s}{k}}(x-x')}}{2i\sqrt{\frac{s}{k}}} \right] = \frac{e^{\sqrt{\frac{s}{k}}(x-x')-st'}}{2k\sqrt{\frac{s}{k}}}, \quad \forall x' > x. \quad (3.3.11)$$

Finalmente, combinando (3.3.10) y (3.3.11) obtenemos  $\bar{G}(x, x'; s, t')$  en todo el espacio.

$$\bar{G}(x, x'; s, t') = \frac{e^{-|x-x'|\sqrt{\frac{s}{k}}-st'}}{2k\sqrt{\frac{s}{k}}}. \quad (3.3.12)$$

Seguidamente, tomamos la transformada de Laplace inversa.

$$G(x, x'; t, t') = \mathcal{L}^{-1}\{\bar{G}(x, x'; s, t')\}.$$

Utilizando software de cálculo simbólico, obtenemos:

$$G(x, x'; t, t') = \frac{H(t-t')}{\sqrt{4\pi k(t-t')}} \exp \left[ -\frac{(x-x')^2}{4\kappa(t-t')} \right]. \quad (3.3.13)$$

La función de Heaviside establece la compatibilidad de la función de Green con el principio de causalidad, de tal forma que solamente está definida cuando  $t > t'$ .

### 3.4. Ecuación de ondas

Para finalizar este capítulo dedicado a la física clásica vamos a determinar la función de Green asociada a la ecuación de onda, con el objetivo de analizar las vibraciones forzadas  $u(x, t)$ .

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = f(x, t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t. \quad (3.4.1)$$

Donde  $c > 0$  se corresponde a la velocidad de propagación de la onda. Las condiciones de contorno asociadas al problema se corresponden a las de una cuerda de longitud  $L$ :

$$u(0, t) = u(L, t) = 0, \quad 0 < t. \quad (3.4.2)$$

Y las condiciones iniciales:

$$u(x, 0) = u_t(x, 0) = 0, \quad 0 < x < L. \quad (3.4.3)$$

Con todo esto, tenemos que la función de Green  $G(x, x'; t, t')$  asociada al problema serán las siguientes:

$$\frac{\partial^2 G(x, x'; t, t')}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 G(x, x'; t, t')}{\partial x^2} = \delta(x - x')\delta(t - t'), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t. \quad (3.4.4)$$

Las condiciones de contorno:

$$G(0, x'; t, t') = G(L, x'; t, t') = 0, \quad 0 < t. \quad (3.4.5)$$

Las condiciones iniciales

$$G(x, x'; 0, t') = G_t(x, x'; 0, t') = 0, \quad 0 < x < L. \quad (3.4.6)$$

Tomando la transformada de Laplace (3.3.2) de (3.4.4) y considerando las condiciones iniciales obtenemos:

$$\frac{\partial^2 \bar{G}(x, x'; t, t')}{\partial x^2} - \frac{s^2}{c^2} \bar{G}(x, x'; t, t') = -\frac{\delta(x - x')}{c^2} e^{-st'}, \quad 0 < x < L. \quad (3.4.7)$$

El problema de Sturm-Liouville que se presenta ya ha sido resuelto en el **Ejemplo 1** del capítulo anterior. Tomando la ecuación (2.4.20) de la función de Green y adaptándola a la ecuación (3.4.7), podemos escribir:

$$\bar{G}(x, x'; s, t') = \frac{2e^{-st'}}{L} \sum_n \frac{\sin\left(\frac{n\pi}{L}x'\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)}{s^2 + c^2 \frac{n^2\pi^2}{L^2}} \quad (3.4.8)$$

Tomando la transformada inversa de Laplace, obtenemos la función de Green.

$$G(x, x'; t, t') = \frac{2}{\pi c} H(t - t') \sum_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x'\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n\pi c(t - t')}{L}\right).$$

— “If quantum mechanics  
hasn’t profoundly shocked  
you, you haven’t understood  
it yet.”

—Niels Bohr—

# 4

## Funciones de Green en mecánica cuántica

En el desarrollo de la mecánica cuántica aparecen, con frecuencia, problemas de condiciones de contorno; lo cual muestra la necesidad de implementar métodos para su resolución. Uno de los más utilizados se corresponde al método de las funciones de Green. Evidentemente, estos métodos se centran en el estudio de las ecuaciones que describen los sistemas cuánticos. La exposición de este tema se va a realizar de forma gradual, considerando en primer lugar el caso más sencillo, que se corresponde al de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Posteriormente, procederemos al estudio más general de la ecuación de Schrödinger, incluyendo la dependencia respecto del tiempo. Finalmente, aunque no tendremos en cuenta los efectos relativistas, cabe destacar la importancia de las funciones de Green asociadas a la ecuación de Klein-Gordon y a la ecuación de Dirac, en la teoría cuántica de campos; esto es debido a que el concepto de función de Green está ligado al concepto de propagador. Para más información sobre el tema consultar [20].

### 4.1. Función de Green independiente del tiempo

Comenzamos con el estudio de las funciones de Green en mecánica cuántica analizando el caso independiente del tiempo. Procederemos a su desarrollo de forma análoga a como se procede en [11] y [12].

**Definición 4.1.1** Sea  $z$  un número complejo y  $\widehat{L}(\mathbf{r})$  un operador hermítico. La función de Green  $\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$  se define como la solución a la siguiente ecuación inhomogénea:

$$[z - \widehat{L}(\mathbf{r})]\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.1.1)$$

Además, supongamos que el operador hermítico  $\widehat{L}(\mathbf{r})$  es lineal. La correspondiente ecuación de autofunciones:

$$\widehat{L}(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n\phi_n(\mathbf{r}), \quad (4.1.2)$$

donde se tiene que los autovalores  $\lambda_n$  son reales. En lo sucesivo consideremos que  $Re[z] = \lambda$  y que  $Im[z] = s$ . Dado que se trata de un operador hermítico, las autofunciones conforman un conjunto ortonormal de autofunciones, i.e:

$$\int \phi_n^*(\mathbf{r})\phi_m(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{mn}. \quad (4.1.3)$$

La correspondiente relación de cierre, teniendo en cuenta que el espectro del operador  $\widehat{L}(\mathbf{r})$  puede ser discreto o continuo:

$$\sum_n \phi_n^*(\mathbf{r}')\phi_n(\mathbf{r}) + \int dn \phi_n^*(\mathbf{r}')\phi_n(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.1.4)$$

Por lo tanto el parámetro  $n$  puede ser discreto o continuo. A continuación, trabajaremos en la representación de posiciones (*r-representación*), es decir, en la base de autoestados del operador posición. A este fin, consideremos la notación de Dirac. Por lo tanto, tenemos las siguientes relaciones:

$$\phi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \phi_n \rangle, \quad (4.1.5)$$

$$\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) \equiv \langle \mathbf{r} | \widehat{G}(z) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (4.1.6)$$

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.1.7)$$

$$\int |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| d\mathbf{r} = 1. \quad (4.1.8)$$

Por lo tanto, podemos escribir:

$$(z - \widehat{L})\widehat{G}(z) = 1, \quad (4.1.9)$$

$$\widehat{L}|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle, \quad (4.1.10)$$

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (4.1.11)$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| + \int dn |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1. \quad (4.1.12)$$

De la misma manera podemos trabajar en la representación de momentos (*p(k)-representación*), es decir, en la base de autoestados del operador momento. Con todo esto, tenemos que la solución a (4.1.1) es:

$$\widehat{G}(z) = \frac{1}{z - \widehat{L}}. \quad (4.1.13)$$

Teniendo en cuenta la relación de cierre (4.1.12), podemos escribir:

$$\begin{aligned}
\widehat{G}(z) &= \frac{1}{z - \widehat{L}} \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \int dn |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \\
&= \sum_n \frac{1}{z - \widehat{L}} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \int dn \frac{1}{z - \widehat{L}} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \\
&= \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - \lambda} + \int \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - \lambda} dn.
\end{aligned} \tag{4.1.14}$$

Donde en la última igualdad hemos tenido en cuenta la siguiente propiedad de la función de un operador:  $F(\widehat{L})|\phi_n\rangle = F(\lambda_n)|\phi_n\rangle$ . De forma equivalente, tenemos que en la representación de posiciones (*r-representación*):

$$\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}')}{z - \lambda_n} + \int \frac{\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}')}{z - \lambda_n} dn. \tag{4.1.15}$$

Puesto que el operador  $\widehat{L}$  es hermítico todos sus autovalores  $\lambda_n$  son reales. Por lo tanto,  $\widehat{G}(z)$  es analítica en el *z-plano complejo*, excepto para los puntos del eje real que coinciden con los autovalores discretos de  $\widehat{L}$ . De (4.1.14) se deduce que los residuos de los polos simples  $P_n$  se corresponden a los autovalores discretos de  $\widehat{L}$ . Por lo tanto, teniendo en cuenta la representación integral de dichos residuos, basada en el teorema de los residuos, podemos escribir:

$$P_n = |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{dz}{z - \widehat{L}}. \tag{4.1.16}$$

En el caso de que el espectro sea continuo  $\{\lambda\}$ , la función de Green  $\widehat{G}(z)$  presenta una rama de discontinuidad sobre el eje real  $z = \lambda$ . En cualquier caso, en aquellos puntos del eje real que verifiquen  $z = \lambda_n$ , la función no está definida; puesto que posee un polo de primer orden o una rama de discontinuidad, como se muestra en la Figura 4.1.

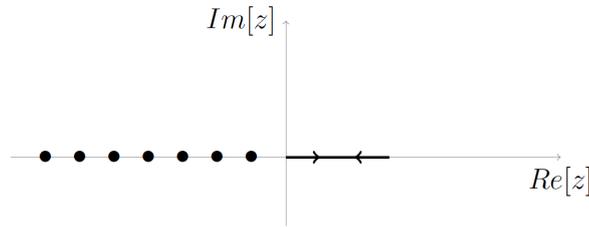


Figura 4.1: Discontinuidad del plano complejo  $z$  en los autovalores  $\widehat{L}$

Para soslayar dicho problema, cuando  $z = \lambda$ , definimos la función de Green como un límite. En consecuencia, introducimos las siguientes funciones:

$$\widehat{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} \widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda + is). \quad \widehat{G}^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^-} \widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda + is). \tag{4.1.17}$$

Nótese que estas funciones estarán definidas cuando el anterior límite existe y converge. De (4.1.14) se deduce que:

$$\widehat{G}^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z^*). \quad (4.1.18)$$

Si  $\lambda$  pertenece al espectro del operador  $\widehat{L}$ , tenemos que se verifica que:

$$\widehat{G}^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda) = [\widehat{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda)]^*, \quad (4.1.19)$$

lo que implica:

$$Re\{\widehat{G}^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda)\} = Re\{\widehat{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda)\}, \quad (4.1.20)$$

$$Im\{\widehat{G}^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda)\} = -Im\{\widehat{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda)\}. \quad (4.1.21)$$

A continuación, examinemos la discontinuidad entre ambas funciones a lo largo del eje real:

$$\begin{aligned} \widehat{\Delta G}(z) &\equiv \widehat{G}^+(z) - \widehat{G}^-(z) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} [\widehat{G}^+(\lambda + is) - \widehat{G}^-(\lambda - is)] = \lim_{s \rightarrow 0} \left( \frac{1}{\lambda + is - \widehat{L}} - \frac{1}{\lambda - is - \widehat{L}} \right). \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la siguiente igualdad, cuya demostración se puede encontrar en [11]:

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{s}{(\lambda - L)^2 + s^2} = \pi \delta(\lambda - \widehat{L}), \quad (4.1.22)$$

resulta que:

$$\widehat{\Delta G} = -2\pi i \delta(\lambda - \widehat{L}) = -2\pi i \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n^*(\mathbf{r}') \phi_n(\mathbf{r}). \quad (4.1.23)$$

Recuérdese que el parámetro  $n$  también puede ser continuo.

$$\widehat{\Delta G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda) = -2\pi i \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}') - 2\pi i \int dn \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}'). \quad (4.1.24)$$

La cantidad  $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$  se corresponde al número de estados para  $\lambda$ , es decir, a  $N(\lambda)$ . Y la cantidad

$$\rho(\mathbf{r}; \lambda) = \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}) + \int dn \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}), \quad (4.1.25)$$

es la densidad de estados por unidad de volumen. En consecuencia:

$$N(\lambda) = \int \rho(\mathbf{r}; \lambda) d\mathbf{r}. \quad (4.1.26)$$

Por lo tanto, tenemos que  $\widehat{G}^+$  y  $\widehat{G}^-$  no son el mismo operador y que su diferencia esta relacionada con la densidad de estados.

$$\widehat{\Delta G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \lambda) = -2\pi i \rho(\mathbf{r}; \lambda) \quad (4.1.27)$$

Finalmente, veamos que la función de Green nos va a permitir obtener la solución le ecuación inhomogénea general. Por lo tanto, consideremos el siguiente Teorema que muestra la utilidad de las funciones de Green en el estudio de la ecuaciones inhomogéneas:

**Teorema 4.1.1** *Sea  $z$  un número complejo y  $\widehat{L}(\mathbf{r})$  un operador hermítico, lineal e independiente del tiempo. Consideremos la ecuación diferencial inhomogénea:*

$$[z - \widehat{L}(\mathbf{r})]u(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \quad (4.1.28)$$

La solución  $u(\mathbf{r})$  a la ecuación diferencial viene dada por:

$$u(\mathbf{r}) = \begin{cases} \int \widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' & \text{si } z \neq \lambda_n \\ \int \widehat{G}^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \phi(\mathbf{r}) & \text{si } z = \lambda_n \end{cases} \quad (4.1.29)$$

donde  $\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$  es la función de Green asociada al problema y  $\phi(\mathbf{r})$  la solución general a la ecuación homogénea.

Aunque hemos hecho un estudio general de las funciones de Green independientes del tiempo, nuestro objetivo es el estudio de sistemas cuánticos que vienen gobernados por la ecuación de Schrödinger.

$$[z - \widehat{H}(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = 0. \quad (4.1.30)$$

De esta forma haciendo las siguientes sustituciones:

- $\widehat{L}(\mathbf{r}) \longrightarrow \widehat{H}(\mathbf{r})$ , siendo  $\widehat{H}$  el operador hamiltoniano del sistema.
- $\lambda \longrightarrow E$ .
- $z = \lambda + is \longrightarrow z = E + is$ .
- $\lambda_n \longrightarrow E_n$ .

La función de Green asociada al la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que satisface la ecuación:

$$[z - \widehat{H}(\mathbf{r})]\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.1.31)$$

Por lo tanto, podemos escribir:

$$\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - E} + \int \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - E} dn. \quad (4.1.32)$$

Se deduce, entonces, que las singularidades de  $\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$  son reales. Además, los polos de la función de Green se corresponden al espectro de energías discretas  $\{E_n\}$  del sistema, cuando  $E < 0$ . En el caso  $E > 0$ , tendremos la correspondiente rama de discontinuidad.

### 4.1.1. Funciones de Green y teoría de perturbaciones

El cálculo de la integral (4.1.32) en general no es sencilla y por lo tanto es necesario recurrir a desarrollo perturbativos. A este fin, consideremos un hamiltoniano de la forma:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{W}. \quad (4.1.33)$$

Donde  $\widehat{H}_0$  es el hamiltoniano no perturbado, cuyos autovectores (y función de Green asociada) son sencillos de calcular y  $\widehat{W}$  es el hamiltoniano perturbado, cuyos autovectores (y función de Green asociada) son, en general, difíciles de calcular. Las correspondientes funciones de Green asociadas a  $\widehat{H}_0$  y  $\widehat{H}$ :

$$\widehat{G}_0 = \frac{1}{z - \widehat{H}_0}. \quad \widehat{G} = \frac{1}{z - \widehat{H}}. \quad (4.1.34)$$

De (4.1.34) se deduce la siguiente relación entre ambas funciones de Green:

$$\widehat{G} = \frac{1}{z - \widehat{H}_0 - \widehat{W}} = \frac{1}{(z - \widehat{H}_0)[1 - (z - \widehat{H}_0)^{-1}\widehat{W}]} = \frac{\widehat{G}_0}{1 - \widehat{G}_0\widehat{W}}. \quad (4.1.35)$$

Considerando el desarrollo en series de potencias de  $[1 - \widehat{G}_0\widehat{W}^{-1}]$ , obtenemos:

$$\widehat{G} = \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0\widehat{W}\widehat{G}_0 + \widehat{G}_0\widehat{W}\widehat{G}_0\widehat{W}\widehat{G}_0 + \dots \quad (4.1.36)$$

que se puede escribir:

$$\widehat{G} = \widehat{G}_0 + \underbrace{[\widehat{G}_0 + \widehat{G}_0\widehat{W}\widehat{G}_0 + \widehat{G}_0\widehat{W}\widehat{G}_0\widehat{W}\widehat{G}_0 + \dots]}_G \widehat{W}\widehat{G}_0, \quad (4.1.37)$$

de donde se deduce la siguiente expresión de recurrencia:

$$\widehat{G} = \widehat{G}_0 + \widehat{G}\widehat{W}\widehat{G}_0. \quad (4.1.38)$$

En la representación de posiciones (*r-representación*), (4.1.38) se escribe:

$$\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \widehat{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) + \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \widehat{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; z) \widehat{W}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \widehat{G}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'; z). \quad (4.1.39)$$

Ahora, consideremos la ecuación schrödinger independiente del tiempo:

$$(E - \widehat{H}_0)|\psi\rangle = \widehat{W}|\psi\rangle, \quad (4.1.40)$$

donde  $E$  pertenece al espectro continuo de  $\widehat{H}$ . Por lo tanto, del Teorema 4.1.1 se deduce que la solución a (4.1.40), cuando  $z = E_n$ , es:

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + \widehat{G}_0^\pm(E)\widehat{W}|\psi^\pm\rangle, \quad (4.1.41)$$

donde  $|\phi\rangle$  es la solución a  $(E - \widehat{H}_0)|\phi\rangle = 0$ . En el caso de que  $E$  no pertenezca el espectro de  $\widehat{H}_0$  tenemos que:

$$|\psi\rangle = \widehat{G}_0(E)\widehat{W}|\psi^\pm\rangle. \quad (4.1.42)$$

De forma equivalente en la representación de posiciones (*r-representación*):

$$\psi^\pm(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \widehat{G}_0^\pm(\widehat{r}, \widehat{r}_1; E) \widehat{W}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi^\pm(\mathbf{r}_2). \quad (4.1.43)$$

En el caso particular de que  $\widehat{W}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \widehat{V}(\widehat{r}_1)$ , la ecuación (4.1.43) se transforma en la ecuación *Lippman-Schwinger* :

$$\psi^\pm(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}_1 \widehat{G}_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; E) \widehat{V}(\mathbf{r}_1) \psi^\pm(\mathbf{r}_1). \quad (4.1.44)$$

## 4.2. Aplicaciones a la teoría de dispersión

La función de Green asociada a una partícula libre es fundamental en el estudio de los fenómenos de dispersión por un potencial  $V(\mathbf{r})$ . La correspondiente ecuación de Schrödinger del sistema:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}). \quad (4.2.1)$$

Teniendo en cuenta que para un partícula libre  $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$ , la ecuación (4.2.1) se puede reescribir de la siguiente forma:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (4.2.2)$$

En ausencia del potencial de dispersión, la ecuación se corresponde a la de una partícula libre y tiene la forma de la *ecuación de Hemholtz*:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.2.3)$$

La función de Green independiente del tiempo viene definida por:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k^2) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.2.4)$$

Recordemos la expresión de la función de Green:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{1}{z - H}. \quad (4.2.5)$$

A continuación, para hallarla pasemos a trabajar en la representación de momentos (método de la transformada de Fourier). De la que se tiene que:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}. \quad (4.2.6)$$

Introduciendo la relación de cierre de los autoestados del operador momento, la ecuación (4.2.5) se escribe:

$$G_0(E) = \langle \mathbf{r} | G_0(E) | \mathbf{r}' \rangle \quad (4.2.7)$$

$$= \int d^3 \mathbf{p} d^3 \mathbf{p}' \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \frac{1}{z - H} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{z - \frac{p^2}{2m}} d\mathbf{p}. \quad (4.2.8)$$

Teniendo en cuenta que para una partícula libre  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ .

$$p^2 = (\hbar k)^2, \quad z = E + is = \frac{(\hbar k)^2}{2m} + is, \quad (4.2.9)$$

e introduciendo el parámetro  $\eta$ :

$$\eta = \frac{\sqrt{2mz}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E + is)}}{\hbar}. \quad (4.2.10)$$

Entonces, se puede escribir:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{q^2 - \eta^2} d\mathbf{k}. \quad (4.2.11)$$

Resolveremos esta integral mediante el uso de coordenadas esféricas. Sin pérdida de generalidad supongamos que  $\mathbf{R} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  está orientado a lo largo del eje- $z$ , lo que implica que  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = kR \cos(\theta)$ . Además, recordemos que  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ . Tenemos:

$$\begin{aligned} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty q^2 \sin \theta \frac{e^{ikR \cos \theta}}{k^2 - \eta^2} k q \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty k^2 \sin \theta \frac{e^{ikR \cos \theta}}{q^2 - \eta^2} dk \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^2 i R} \int_0^\infty k \frac{e^{ikR} - e^{-iqR}}{k^2 - \eta^2} dk \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^2 i R} \left[ \int_0^\infty k \frac{e^{ikR}}{k^2 - \eta^2} dk + \int_{-\infty}^0 k \frac{e^{ikR}}{k^2 - \eta^2} dk \right] \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^2 i R} \int_{-\infty}^\infty k \frac{e^{ikR}}{(k - \eta)(k + \eta)} dk. \end{aligned} \quad (4.2.12)$$

Por lo tanto, la determinación de la función de Green se reduce al cálculo de una integral que resolveremos mediante la aplicación del Teorema 2.5.3. Dada las características de las singularidades que vamos a estudiar el Teorema anterior es equivalente al Teorema de los residuos. Cabe destacar que la función a integrar tiene dos polos  $q = \pm \eta$  de orden uno. Consideremos los siguientes casos:

**Caso  $E \geq 0$**  Tenemos que  $\eta = \frac{\sqrt{2m(E+is)}}{\hbar}$ , luego tomando el límite obtenemos

$$\lim_{s \rightarrow 0} \pm \eta = \pm k. \quad (4.2.13)$$

Se tiene entonces que ambos polos se localizan sobre el eje real por lo que recurriremos a la definición de  $G_0^+$  y  $G_0^-$ . Se deduce entonces que  $\pm \eta$  no se localizan sobre el eje real, como se muestra en la Figura 4.2.

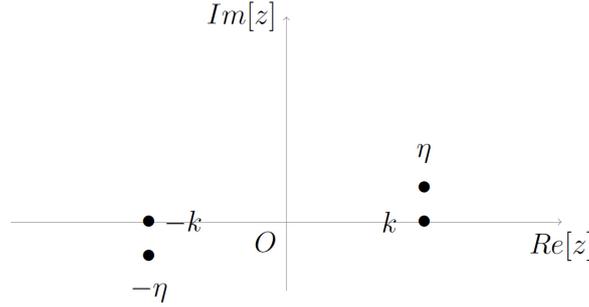


Figura 4.2: Polos de la función de Green asociada a una partícula libre para  $E \geq 0$ .

Procedemos a calcular los residuos asociados a cada polo.

$$\begin{aligned} \text{Res} \left[ k \frac{e^{ikR}}{(k-\eta)(k+\eta)} dk; +\eta \right] &= \lim_{k \rightarrow \eta} \left[ k(k-\eta) \frac{e^{ikR}}{(k-\eta)(k+\eta)} dk; +\eta \right] \\ &= \lim_{k \rightarrow \eta} \frac{k}{(\eta+k)} e^{i\eta R} = \frac{1}{2} e^{i\eta R}. \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

De forma similar, tenemos que:

$$\text{Res} \left[ k \frac{e^{ikR}}{(k-\eta)(k+\eta)} dk; -\eta \right] = -\frac{1}{2} e^{-i\eta R}. \quad (4.2.15)$$

Aplicando el Teorema 2.5.3 (debemos considerar el polo sobre el plano superior) y tomando el límite  $s \rightarrow 0^+$ , obtenemos  $G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ :

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{s \rightarrow 0^+} -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^2 i R} 2\pi i \left[ \frac{1}{2} e^{i\eta R} \right], \quad (4.2.16)$$

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad E > 0. \quad (4.2.17)$$

Dicha función se denomina, frecuentemente, *función de Green "saliente"* dado que está definida cuando  $\mathbf{k}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = kR \cos \theta > 0$ , en concreto, cuando  $\cos \theta = 1$ . Y de forma similar, considerando el polo sobre el semiplano inferior y tomando el límite  $s \rightarrow 0^-$ , obtenemos  $G_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ :

$$G_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{s \rightarrow 0^-} -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^2 i R} (-2\pi i) \left[ -\frac{1}{2} e^{-i\eta R} \right], \quad (4.2.18)$$

$$G_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad E > 0. \quad (4.2.19)$$

Dicha función se denomina, frecuentemente, *función de “Green entrante”* dado que está definida cuando  $kR \cos \theta > 0$ , en particular, cuando  $\cos \theta = -1$ .

En resumen, tenemos que:

$$G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad E > 0. \quad (4.2.20)$$

**Caso  $E \leq 0$**  Tenemos que  $\eta = \frac{\sqrt{2m(E+is)}}{\hbar}$ , luego tomando el límite obtenemos

$$\lim_{s \rightarrow 0} \pm \eta = \pm ik. \quad (4.2.21)$$

Se tiene entonces que ambos polos se localizan sobre el eje imaginario, como se muestran en la Figura 4.3.

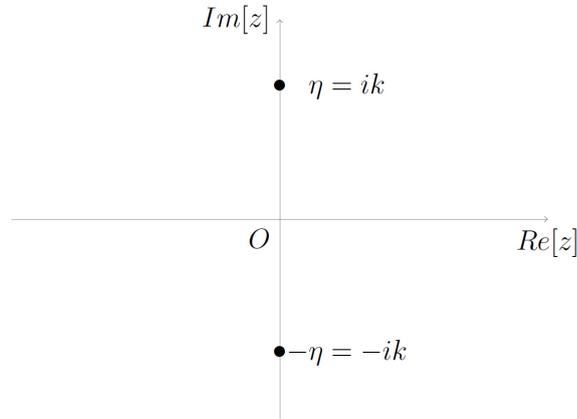


Figura 4.3: Polos de la función de Green asociada a una partícula libre para  $E \leq 0$ .

Procedemos a calcular los residuos asociados a cada polo:

$$\begin{aligned} \text{Res} \left[ k \frac{e^{ikR}}{(k - \eta)(k + \eta)} dk; +\eta \right] &= \lim_{k \rightarrow \eta} \left[ k(k - \eta) \frac{e^{ikR}}{(k - \eta)(k + \eta)} dq; +\eta \right] \\ &= \lim_{k \rightarrow \eta} \frac{k}{(\eta + k)} e^{ikR} = \frac{1}{2} e^{-kR}. \end{aligned} \quad (4.2.22)$$

De forma similar, tenemos que:

$$\text{Res} \left[ k \frac{e^{ikR}}{(k - \eta)(k + \eta)} dq; -\eta \right] = -\frac{1}{2} e^{+kR}. \quad (4.2.23)$$

Como en el caso anterior, aplicando el Teorema de los residuos, obtenemos  $G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ :

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^2 i R} 2\pi i \left[ \frac{1}{2} e^{-kR} \right], \quad (4.2.24)$$

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (4.2.25)$$

Dicha función está definida cuando  $kR > 0$ , esto es, cuando  $\cos \theta = 1$ . Y de la misma forma  $G_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ , obtenemos:

$$G_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^2 i R} (-2\pi i) \left[ +\frac{1}{2} e^{+kR} \right], \quad (4.2.26)$$

$$G_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{+k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (4.2.27)$$

La función anterior está definida cuando  $kR \cos \theta < 0$ , esto es, cuando  $\cos \theta = -1$ . Combinando ambas funciones de Green obtenemos  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$  que:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad E < 0. \quad (4.2.28)$$

### 4.2.1. Teoría de dispersión

Puesto que vamos a estudiar los procesos de scattering por un potencial  $V(\mathbf{r})$ , únicamente estamos interesados en los estados no ligados ( $E > 0$ ). Por lo tanto, recurriremos a  $G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E > 0)$ . El problema físico consiste en el estudio de una partícula libre con energía  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , que al ser sometida a un potencial  $V(\mathbf{r})$  modifica su función de onda.

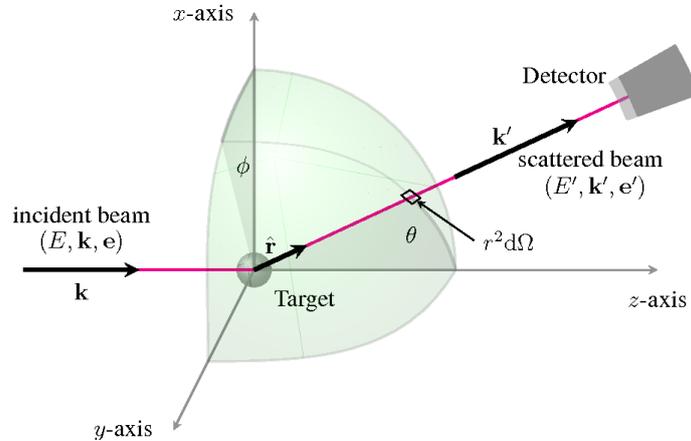


Figura 4.4: Esquema del proceso scattering por un potencial  $V(\mathbf{r})$ .

Por lo tanto consideraremos una perturbación del Hamiltoniano del sistema de la forma  $W = V(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . A este fin, utilizaremos la expresión perturbativa de la función de Green, anteriormente expuesta, así como la función de Green de una partícula libre cuando  $E > 0$ . El objetivo es determinar el comportamiento asintótico de la función de onda cuando  $r \rightarrow \infty$ . La solución al problema viene dada por (4.1.44):

$$\psi^\pm(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \int d\mathbf{r}' G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'}. \quad (4.2.29)$$

Sustituyendo la función de Green  $G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E > 0)$  para una partícula libre:

$$\psi^\pm(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}. \quad (4.2.30)$$

A continuación, vamos a estudiar su comportamiento asintótico  $r \rightarrow \infty$ . Por lo tanto, podemos efectuar la siguiente aproximación  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r - r' \cos \theta$ , que nos permite escribir  $k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq kr - kr' \cos \theta = kr - k'r'$ . Donde hemos introducido el vector  $\mathbf{k}'$  en la dirección de  $\mathbf{r}$ , tal y como se muestra en la Figura 4.5.

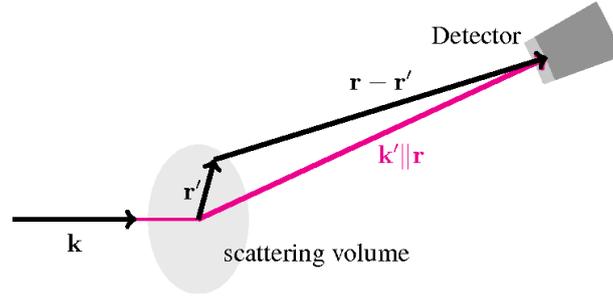


Figura 4.5: Diagrama vectorial del proceso de scattering.

$$\psi^\pm(\mathbf{r}) \longrightarrow e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \int d\mathbf{r}' e^{\mp i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}. \quad (4.2.31)$$

Se considera la función de onda saliente  $\psi^+(\mathbf{r})$ , pues es la que tiene sentido físico relativo al problema. Por lo tanto, la amplitud de dispersión se puede escribir:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}'. \quad (4.2.32)$$

Definiendo  $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ , la expresión anterior se puede escribir en función de la transformada de Fourier del potencial:

$$V(\mathbf{K}) = \int V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}. \quad (4.2.33)$$

### 4.3. Oscilador armónico cuántico

La importancia del oscilador armónico es fundamental, tanto en física clásica como en física cuántica. En el capítulo anterior, ya analizamos la función de Green asociada al oscilador armónico clásico simple y amortiguado. Ahora, consideraremos el oscilador armónico simple desde el punto de vista de la mecánica cuántica. Procederemos a determinar la correspondiente función de Green de acuerdo con [16]. Comencemos considerando el operador Hamiltoniano del sistema:

$$\mathcal{H}^{ho} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (4.3.1)$$

Los correspondientes autovalores y autoestados del Hamiltoniano:

$$\psi_n^{ho}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} H_n(\sqrt{(m\omega/\hbar)}x), \quad (4.3.2)$$

$$E_n^{ho} = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.3.3)$$

Para determinar la función de Green consideremos (4.1.32), que nos proporciona la función de Green en serie de autofunciones del Hamiltoniano. Entonces

$$\begin{aligned} G(x, x'; E) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n^{ho}(x)[\psi_n^{ho}(x')]^*}{E_n^{ho} - E}, \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-m\omega(x^2+x'^2)/(2\hbar)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n^2[\sqrt{(m\omega/\hbar)}x][\sqrt{(m\omega/\hbar)}x']}{2^n n! [\hbar\omega(n + 1/2) - E]}. \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

La función de Green adimensional se obtiene introduciendo la cantidad

$$\mu = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}. \quad (4.3.5)$$

Para simplificar los cálculos consideremos los siguientes parámetros adimensionales:

$$y = \frac{\mu x}{\sqrt{2}}, \quad \psi_n^{ho}(x) = \sqrt{\frac{\mu}{\sqrt{2}}} \phi(y). \quad (4.3.6)$$

Por lo tanto, tenemos que el nuevo Hamiltoniano se puede escribir:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{2\mathcal{H}_{ho}}{\hbar\omega} = -\frac{d^2}{dy^2} + y^2, \quad (4.3.7)$$

siendo las autofunciones y los autovalores

$$\phi(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} e^{-y^2/2} H_n(y), \quad \lambda_n = 2n + 1. \quad (4.3.8)$$

La nueva función de Green adimensional  $\hat{G}(y, y'; \varepsilon)$  se puede expresar en función de la función de Green dimensional.

$$G_{ho}(x, x'; E) = \sqrt{\frac{m}{\omega\hbar^3}} \hat{G}(y, y'; \varepsilon), \quad (4.3.9)$$

$$\hat{G}(y, y'; \varepsilon) = \frac{e^{-(y^2+y'^2)/2}}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)H_n(y')}{2^n n! [n + 1/2 - \varepsilon]}. \quad (4.3.10)$$

A continuación, consideremos el sumatorio:

$$S(z, w; s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)H_n(w)}{2^n n! [n + s]}. \quad (4.3.11)$$

Luego la función de Green se puede escribir:

$$\hat{G}(y, y'; \varepsilon) = \frac{e^{-(z^2+w^2)/2}}{\sqrt{\pi}} S(z, w; s), \quad (4.3.12)$$

donde hemos hecho los siguientes cambios de variables:  $z = y$ ,  $w = y'$  y  $\varepsilon = \frac{1}{2} - s$ . La función  $S(z, w; s)$  es una función meromorfa de  $s$  con polos negativos. Para obtener una expresión alternativa a  $S(z, w; s)$ , tengamos en cuenta que:

$$\frac{1}{n+s} = \int_0^1 u^{n+s-1} du. \quad (4.3.13)$$

Se deduce que:

$$S(z, w; s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)H_n(w)}{2^n n!} \int_0^1 u^{n+s-1} du \quad (4.3.14)$$

$$= \int_0^1 u^{n+s-1} \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)H_n(y^w)}{2^n n!}}_{du}. \quad (4.3.15)$$

Utilizando la formula de Mehler para la suma de la serie, la cual se puede consultar en [18]. Y aplicando el cambio de variable  $t = u^2/(1-u^2)$ , obtenemos:

$$S(z, w; s) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} t^{s/2-1} (t+1)^{-s/2-1/2} e^{-(z^2+w^2)t} e^{2zw\sqrt{t(t+1)}} dt. \quad (4.3.16)$$

Para el cálculo de esta integral consideraremos la forma de la siguiente integral tabulada, cuyo calculo detallado se encuentra en [17], además de ciertas propiedades de las funciones cilíndrico-parabólicas  $D_\nu$ :

$$\begin{aligned} \int_{n=0}^{\infty} \frac{t^{\nu-1}}{(1+t)^{\nu+1/2}} e^{b\sqrt{t(1+t)}-at} dt &= \\ &= 2e^{a/2}\Gamma(2\nu)D_{-2\nu}\left(\sqrt{a+\sqrt{a^2-b^2}}\right)D_{-2\nu}\left(-\sqrt{a+\sqrt{a^2-b^2}}\right). \end{aligned} \quad (4.3.17)$$

con  $\nu > 0$  y  $a > b > 0$ . Por lo tanto, tenemos que hacer las siguientes sustituciones:

$$a = z^2 + w^2, \quad b = 2zw. \quad (4.3.18)$$

Entonces tenemos que:

$$\sqrt{z^2 + w^2 + \sqrt{(z^2 + w^2)^2 - 4z^2w^2}} = \sqrt{z^2 + w^2 + \sqrt{(z^2 - w^2)^2}}. \quad (4.3.19)$$

Se distinguen dos casos:

- Si  $z^2 > w^2$ , entonces  $\sqrt{(z^2 - w^2)^2} = z^2 - w^2$  y en consecuencia (4.3.19) es igual a  $2w^2$ .

- Si  $z^2 < w^2$ , entonces  $\sqrt{(z^2 - w^2)^2} = w^2 - z^2$  y en consecuencia (4.3.19) es igual a  $2z^2$ .

Entonces, podemos escribir:

$$\sqrt{z^2 + w^2 + \sqrt{(z^2 + w^2)^2 - 4z^2w^2}} = \sqrt{2z_>}, \quad (4.3.20)$$

donde  $z_<$  y  $z_>$  representan el menor y mayor de  $z$  y  $w$ , respectivamente. De la misma forma, tenemos que:

$$-\sqrt{z^2 + w^2 - \sqrt{(z^2 + w^2)^2 - 4z^2w^2}} = -\sqrt{2z_<}. \quad (4.3.21)$$

Con todo esto, resulta que:

$$S(z, w; s) = e^{(z^2+w^2)/2} \Gamma(s) D_{-s}(\sqrt{2}z_>) D_{-s}(-\sqrt{2}z_<). \quad (4.3.22)$$

La función  $S(z, w; s)$  es analítica en el  $s$ -plano complejo menos en los polos de la función Gamma de Euler. Finalmente, obtenemos la expresión para la función de Green del oscilador armónico cuántico:

$$G_{ho}(x, x'; \varepsilon) = \sqrt{\frac{m}{\pi\omega\hbar^3}} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \varepsilon\right) D_{\varepsilon-\frac{1}{2}}(\mu x_>) D_{\varepsilon-\frac{1}{2}}(-\mu x_<), \quad (4.3.23)$$

donde  $x_<$  y  $x_>$  representan el menor y mayor de  $x$  y  $x'$ , respectivamente.

## 4.4. Función de Green dependiente del tiempo

Hasta hora, únicamente hemos considerado la función de Green independiente del tiempo. Sin embargo en el estudio de los sistemas cuánticos es fundamental determinar su evolución temporal. En primer lugar, consideraremos la función de Green dependiente del tiempo asociada a una ecuación diferencial de primer orden respecto del tiempo. Luego, veremos que el formalismo de la integral de caminos de Feynman nos proporciona una expresión para la función de Green dependiente del tiempo.

### 4.4.1. Ecuación diferencial de primer orden respecto del tiempo

Procederemos a su desarrollo de forma análoga a como se procede en [11]. Sea  $c$  una constante real positiva y  $\widehat{L}(\mathbf{r})$  un operador lineal, hermítico e independiente del

tiempo. Consideremos la siguiente ecuación diferencial de primer orden con respecto del tiempo:

$$\left[ \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \widehat{L}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t). \quad (4.4.1)$$

Y la correspondiente ecuación homogénea:

$$\left[ \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \widehat{L}(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (4.4.2)$$

donde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  y  $\phi(\mathbf{r}, t)$  están sometidas a las mismas condiciones de contorno.

**Definición 4.4.1** La función de Green  $\widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')$  asociada a la ecuación (4.4.1) se define como la solución a la siguiente ecuación:

$$\left[ \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \widehat{L}(\mathbf{r}) \right] \widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (4.4.3)$$

Introducimos la variable  $\tau = t - t'$  y considerando la transformada de Fourier de la función de Green:

$$\widetilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) e^{-i\omega\tau} d\tau. \quad (4.4.4)$$

Luego, extrayendo la transformada de Fourier de (4.4.3); se obtiene la siguiente ecuación:

$$\left( \frac{\omega}{c} - \widehat{L} \right) \widetilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.4.5)$$

Puesto que dicha ecuación, independiente del tiempo, tiene la misma forma que (4.1.1) se deduce que  $\widetilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$  es una función analítica de variable compleja con polos en el eje real del  $\omega$ -plano complejo. La función de Green se obtiene a partir de la transformada inversa de Fourier. La cual se obtiene considerando la integral a lo largo del contorno de integración  $C$ , que se aproxima al  $\omega$ -eje real  $C_0$ :

$$\widehat{G}^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \lim_{C \rightarrow C_0} \frac{1}{2\pi} \int_C \widetilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) e^{i\omega\tau} d\omega. \quad (4.4.6)$$

Por lo tanto podemos obtener infinitas funciones de Green en función de como la curva  $C$  se aproxima al  $\omega$ -eje real  $C_0$ .

Sin embargo, las opciones que tienen interés físico son las que se muestran en la Figura 4.6 . En este sentido, introducimos las siguientes funciones de Green:

$$\widehat{G}^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) e^{i\omega\tau} d\omega. \quad (4.4.7)$$

La integral anterior se resuelve, de nuevo, mediante la aplicación de teorema 2.5.3, de tal forma que  $\widehat{G}^+$  está definida cuando  $t > t'$ . Y por otro lado,  $\widehat{G}^-$  está definida cuando  $t < t'$ . A partir de las funciones anteriores definimos:

$$\overline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \widehat{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) - \widehat{G}^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau). \quad (4.4.8)$$

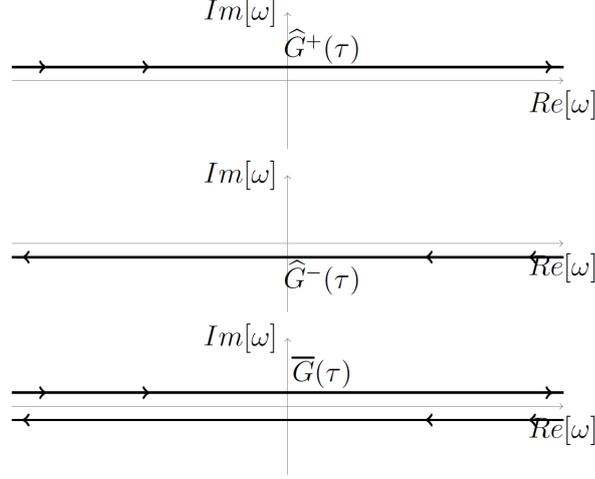


Figura 4.6: Diferentes contornos de integración en el  $\omega$  - plano complejo que se consideran en (4.4.6).

Se deduce, entonces, que la función  $\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$  corresponde a la integral a lo largo del contorno que se muestra en la Figura 4.6. Puesto que se trata de la diferencia de dos funciones de Green verifica (4.4.2) y no verifica (4.4.3). Con todo esto, podemos escribir:

$$\hat{G}^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \pm H(\pm\tau) \bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau), \quad (4.4.9)$$

donde  $H(\tau)$  es la función de Heaviside. Además, se verifica que:

$$\hat{G}^{-}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = [\hat{G}^{+}(\mathbf{r}', \mathbf{r}; -\tau)]^*. \quad (4.4.10)$$

Teniendo en cuenta (4.1.24), podemos escribir:

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) e^{i\omega\tau} d\omega \quad (4.4.11)$$

$$= -2\pi i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega\tau} \sum_n \delta(\omega - \lambda_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}') \quad (4.4.12)$$

$$= -ic \sum_n e^{-ic\lambda_n\tau} \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}'), \quad \tau > 0. \quad (4.4.13)$$

Donde hemos considerado, por sencillez,  $n$  un parámetro discreto, pero también puede ser continuo:

$$\frac{\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)}{-ic} = \left[ \sum_n e^{-ic\lambda_n\tau} \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}') + \int dn e^{-ic\lambda_n\tau} \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}') \right]$$

Se sigue entonces que el operador  $\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$ , se puede escribir:

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = -ic \sum_n e^{-ic\lambda_n\tau} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = -ice^{-ic\hat{L}\tau}. \quad (4.4.14)$$

Resolviendo (4.4.2), se obtiene la expresión del operador evolución:

$$\widehat{U}(t, t') = \exp[-ic\widehat{L}(t - t')], \quad (4.4.15)$$

que describe la evolución temporal del estado  $|\phi\rangle$ , desde el instante  $t'$  al instante  $t$ .

$$|\phi(t)\rangle = \widehat{U}(t, t')|\phi(t')\rangle. \quad (4.4.16)$$

En consecuencia, podemos escribir  $\overline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$  de la siguiente forma:

$$\overline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = -ic\widehat{U}(t - t'), \quad (4.4.17)$$

que es la solución a la ecuación inhomogénea (4.4.2). En lo sucesivo solamente consideraremos  $\widehat{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$  puesto que es la función de Green físicamente aceptable.  
1

**Teorema 4.4.1** *Dada la siguiente ecuación diferencial inhomogénea:*

$$\left[ \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \widehat{L}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t).$$

*Su solución general es:*

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' dt' \widehat{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') f(\mathbf{r}', t') \quad (4.4.18)$$

Aunque hemos hecho un estudio general, no hay que olvidar que nuestro objetivo es el estudio de la ecuación de Schrödinger. Por lo que, posteriormente, particularizaremos la expresión de la función de Green.

## 4.4.2. Integral de Caminos de Feynman

La función de Green para un sistema cuántico, también puede ser construida a partir de la integral de Caminos de Feynman. Un análisis exhaustivo del formalismo de los caminos integrales de Feynman (*path integral*) se encuentra en [19]. La función de Green (o propagador) unidimensional, viene definida por la siguiente expresión:

$$G(x, x'; t, t') = \langle x, t | x', t' \rangle = \int e^{\frac{i}{\hbar} \int \mathcal{L}(\dot{x}, x, t) dt} \mathcal{D}x, \quad (4.4.19)$$

donde el término exponencial de la forma  $e^{\frac{i}{\hbar} S(\dot{x}, x)}$ , representa la contribución de cada camino. Cada cual está caracterizado por su funcional acción. Una forma de resolverlo consiste en discretizar el problema, es decir, dividir el tiempo de la siguiente manera:

$$\epsilon = \frac{t_f - t_i}{n}. \quad (4.4.20)$$

Luego, se tiene que:

$$t_i = t_1 < t_2 \dots < t_n < t_{n+1} = t_f, \quad (4.4.21)$$

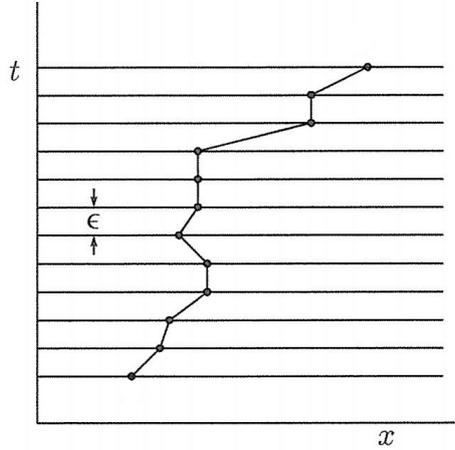


Figura 4.7: Camino integral en “ziga-zag”.

donde  $t_j = t_1 + j\epsilon$ .

Por lo tanto, el camino integral se aproxima por una especie de camino en “ziga-zag” para los puntos  $x_j = x(t_j)$ , como se muestra en la Figura 4.7. En consecuencia, podemos aproximar la integral a lo largo de todos los caminos (4.4.19) mediante una especie de *suma de Riemann*. Por lo tanto, podemos escribir:

$$G(x, x'; t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(\dot{x}, x, t) dt \right] dx_1 dx_2 \dots dx_{n+1}. \quad (4.4.22)$$

Considerando la expresión clásica de la Lagrangiana  $\mathcal{L}(\dot{x}, x, t) = \frac{1}{2}m(\dot{x})^2 - V(x)$ , podemos escribir que:

$$G(x, x'; t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left( \sum_{j=0}^{j=n+1} L(x_j, \frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon}; j) \right) \right] dx_1 dx_2 \dots dx_{n+1}. \quad (4.4.23)$$

## 4.5. Ejemplo de funciones de Green dependientes del tiempo

En esta sección consideraremos la función de Green dependiente del tiempo asociada a la ecuación de Schrödinger para diferentes sistemas. Adaptamos la expresión (4.1.1) para la ecuación de Schrödinger considerando el operador Hamiltoniano

<sup>1</sup>Nótese que hemos considerado  $\widehat{G}^+(\tau)$  en vez de  $\widehat{G}^-(\tau)$ . Esto es debido al principio de causalidad, pues la evolución del estado  $|\psi\rangle$  en el instante  $t$  depende de la acción de la fuente  $f$  en el instante anterior  $t'$ .

$$\widehat{H} \equiv \widehat{L} \text{ y } c = \frac{1}{\hbar}.$$

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \widehat{H}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t). \quad (4.5.1)$$

En consecuencia, obtenemos la forma genérica (4.4.11) de la función de Green dependiente del tiempo:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = -\frac{i}{\hbar} \sum_n e^{-\frac{i E_n(t-t')}{\hbar}} \phi_n^*(\mathbf{r}') \phi_n(\mathbf{r}). \quad (4.5.2)$$

### 4.5.1. Partícula libre

Comencemos con el caso más sencillo que se corresponde al de una partícula libre, cuyo Hamiltoniano es  $\widehat{H} = \frac{\widehat{P}^2}{2m}$ . La función de Green asociada a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo viene dada por:

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (4.5.3)$$

Identificando el operador  $\widehat{P} := -i\hbar \nabla$ , tenemos que las correspondientes autofunciones del Hamiltoniano del sistema son  $\phi_n(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ , normalizadas al volumen unitario. Y los correspondientes autovalores  $E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Por lo tanto, de (4.5.2) y escribiendo  $\tau = t - t'$ , se deduce que la función de Green adquiere la siguiente forma:

$$G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = -i/\hbar \int \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-i\hbar k^2 \tau / 2m} d^3\mathbf{k}, \quad \tau > 0. \quad (4.5.4)$$

Escribiendo  $\varrho = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$  y  $k^2 = \sum_i k_i^2$ , podemos considerar cada componente del espacio<sup>2</sup>:

$$\begin{aligned} G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= -\frac{i}{\hbar} \prod_i^3 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_i}{2\pi} e^{(ik_i \varrho_i - i\hbar k_i^2 \tau / 2m)} = -\frac{i}{\hbar} \prod_i^3 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_i}{2\pi} e^{i\varrho_i^2 m / 2\hbar \tau} e^{-i\hbar \tau k^2 / 2m} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \prod_i^3 e^{i\varrho_i^2 m / 2\hbar \tau} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\pi m}{i\hbar \tau}} = -\frac{i}{\hbar} \left( \frac{m}{2\pi i\hbar \tau} \right)^{3/2} e^{i\varrho^2 m / 2\hbar \tau}, \quad \tau > 0. \end{aligned} \quad (4.5.5)$$

Finalmente, podemos escribir:

$$G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = -\frac{i}{\hbar} \left( \frac{m}{2\pi i\hbar \tau} \right)^{3/2} e^{i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 m / 2\hbar \tau} H(\tau), \quad (4.5.6)$$

donde recordemos que  $H(\tau)$  representa la función de Heaviside.

<sup>2</sup>Recordemos la expresión de la integral Gaussiana:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad a > 0.$$

## 4.5.2. Oscilador armónico

En este apartado procederemos a determinar el propagador asociado al oscilador armónico mediante los caminos integrales de Feynman. En primer lugar, consideremos la Lagrangiana clásica del sistema:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad (4.5.7)$$

y las condiciones de contorno  $x(t_i) = x_i$  y  $x(t_f) = x_f$ . Entonces, el camino clásico es:

$$x^{cl}(t) = x_i \frac{\sin[\omega(t_f - t)]}{\sin[\omega(t_f - t_i)]} + x_f \frac{\sin[\omega(t - t_i)]}{\sin[\omega(t_f - t_i)]}. \quad (4.5.8)$$

Ahora, evaluemos la acción a lo largo del camino:

$$S[x^{cl}] = \int_{t_i}^{t_f} \left( \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) dt = \frac{1}{2}m\omega \frac{(x_i^2 + x_f^2) \cos[\omega(t_f - t_i)] - 2x_i x_f}{\sin[\omega(t_f - t_i)]}. \quad (4.5.9)$$

Puesto que el camino que describe el oscilador armónico  $x(t)$  es simétrico y va del instante  $t_i = 0$  al instante  $t_f = T$  (periodo de oscilación), se puede escribir como una serie de Fourier de la siguiente manera:

$$x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{n\pi t}{T}. \quad (4.5.10)$$

De este forma el camino descrito por el oscilador se puede especificar a partir de los coeficientes  $a_n$ , que se deben determinar. La variación del camino clásico en segundo orden de aproximación, sobre la funcional acción, se escribe como:

$$S[x^{cl} + dx] = S[x^{cl}] + \left[ \int_0^T \left( \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) dt \right] dx. \quad (4.5.11)$$

A continuación, introducimos el desarrollo en serie de Fourier (4.5.10) en el segundo término de la expresión. En primer lugar, consideremos el término asociado a la energía cinética:

$$\begin{aligned} \frac{m}{2} \int_0^T \dot{x}^2 dt &= \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2 \int_0^T \cos^2 \frac{n\pi t}{T} dt \\ &= \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2 \left[ \frac{t}{2} + \frac{\sin(2\frac{n\pi t}{T})}{\frac{4n\pi}{T}} \right]_0^T = \frac{m}{2} \frac{T}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2. \end{aligned}$$

De forma similar se procede con el término asociado a la energía potencial:

$$\frac{m\omega^2}{2} \int_0^T x^2 dt = \frac{m\omega^2}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2 \int_0^T \sin^2 \frac{n\pi t}{T} dt = \frac{m\omega^2}{2} \frac{T}{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2.$$

Se tiene entonces que:

$$S[x^{cl} + \delta x] = S[x^{cl}] + \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{mT}{2} \frac{a_n^2}{2} \left( \frac{(n\pi)^2}{T^2} - \omega^2 \right) \right] da_n.$$

Luego podemos escribir el propagador de acuerdo con (4.4.23) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} G(x, x'; t, t') &= C_1 e^{\frac{i}{\hbar} S[x^{cl}]} \prod_{j=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} da_j \exp \left[ \frac{imT}{2\hbar} \frac{a_j^2}{2} \left( \frac{(j\pi)^2}{T^2} - \omega^2 \right) \right] \\ &= C_2 e^{\frac{i}{\hbar} S[x^{cl}]} \prod_{j=1}^{\infty} \left( \frac{(j\pi)^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Donde  $C_1$  y  $C_2$  son constantes. Mencionar también que ha aparecido una integral de forma Gaussiana. Consideremos ahora:

$$\prod_{j=1}^N \left( \frac{(j\pi)^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-\frac{1}{2}} = \prod_{j=1}^N \left( \frac{(j\pi)^2}{T^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N \left( 1 - \frac{\omega^2 T^2}{j^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (4.5.12)$$

El primer factor es independiente de  $\omega$ , por lo que lo consideraremos como una constante. A continuación, tomamos el límite de  $N \rightarrow \infty$  y consideremos la siguiente igualdad:

$$\prod_{j=1}^{\infty} \left( 1 - \frac{x^2}{j^2} \right) = \frac{\sin(\pi x)}{\pi x}. \quad (4.5.13)$$

En consecuencia:

$$G(x, x'; t, t') = C e^{\frac{i}{\hbar} S[x^{cl}]} \left( \frac{\sin(\omega T)}{\omega T} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (4.5.14)$$

Donde  $C$  es una constante de normalización, cuyo valor se obtiene a partir del formalismo de caminos integrales para una partícula libre, esto es, cuando  $\omega = 0$ . De esta forma, se deduce la ecuación de Schrödinger a partir del formalismo de la integral de caminos. Su valor se puede encontrar en [19]:

$$C = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}}. \quad (4.5.15)$$

Por lo tanto se tiene que:

$$G(x, x'; t, t') = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x^{cl}]}. \quad (4.5.16)$$

Finalmente, podemos escribir:

$$G(x, x'; t, t') = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \exp \left( \frac{i}{2\hbar} m\omega \frac{(x_i^2 + x_f^2) \cos \omega T - 2x_i x_f}{\sin \omega T} \right).$$

— “Nature uses only the longest threads to weave her patterns, so that each small piece of her fabric reveals the organization of the entire tapestry.”

—Richard P. Feynman—

# 5

## Funciones de Green en la teoría electromagnética

En este capítulo analizaremos la aplicación de las funciones de Green en la teoría electromagnética. En primer lugar, comenzaremos con el estudio de los problemas electrostáticos a través de la ecuación de Laplace y la ecuación de Poisson. En este sentido, veremos la estrecha relación que existe entre el método de las funciones de Green y el método de las imágenes. Todo ello se aplicará a un sistema electrostático relativamente sencillo. Posteriormente, analizaremos las ecuaciones de Maxwell con el objetivo de obtener los potenciales de retardo, de gran importancia en el estudio de los fenómenos radiativos. Con este problema fundamental en electrodinámica clásica concluiremos el capítulo.

### 5.1. Electroestática

Los problemas de condiciones de contorno en electrostática se centran en el estudio de la ecuación de Laplace y Poisson. Por lo tanto, expondremos el método para la obtención de las funciones de Green asociadas a dichas ecuaciones, tal y como se presenta en [21]. Consideremos un cierto sistema electrostático de volumen  $V$ , delimitado por la superficie cerrada  $S$ , en el cual está definida la función potencial eléctrico  $\Phi(\mathbf{r})$ . La ecuación de Poisson:

$$\nabla^2\Phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}. \quad (5.1.1)$$

Se distinguen entonces, las siguientes condiciones de contorno:

- Condiciones de *Dirichlet*: especifican el potencial en una superficie cerrada  $S$ .

- Condiciones de *Neumann*: especifican la derivada parcial  $\partial_n$  del potencial en la dirección normal ( $\vec{n}$ ) a la superficie cerrada  $S$ .

**Función de Green** A continuación determinaremos la función de Green asociada al problema de *Dirichlet* y *Neumann*.

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (5.1.2)$$

donde el factor  $-4\pi$  se incluye con el objetivo de simplificar la expresión de la función de Green. Teniendo en cuenta la siguiente propiedad de la delta de Dirac (Capítulo 2), que establece que:

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (5.1.3)$$

podemos escribir:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + F(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (5.1.4)$$

donde la función  $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  verifica la ecuación de Laplace  $\nabla^2 F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$ . Posteriormente, veremos la interpretación física de cada término de (5.1.4). A partir de la *identidad la Green*<sup>1</sup> e identificando las funciones de la siguiente manera  $\phi = \Phi(\mathbf{r}')$  y  $\psi = G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , podemos escribir:

$$\int_V [\Phi(\mathbf{r}')\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}')] dV' = \oint_S [\Phi(\mathbf{r}')\partial_n G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\partial_n \Phi(\mathbf{r}')] dS'.$$

Por lo tanto, sustituyendo (5.1.1) y (5.1.2) se obtiene la siguiente expresión para el potencial  $\Phi(\mathbf{r})$ , que queremos determinar:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')dV' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \left[ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\frac{\partial\Phi(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \Phi(\mathbf{r}')\frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \right] dS'. \quad (5.1.5)$$

Incluyendo en el segundo término de la expresión anterior las condiciones de contorno, obtenemos una expresión particular para las condiciones de *Dirichlet* y de *Neumann*. De esta forma obtenemos la expresión del potencial eléctrico en función de la función de Green del sistema. Para el caso de las condiciones de contorno *Dirichlet* se tiene que:

$$G_D(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \quad \forall \mathbf{r}' \in S. \quad (5.1.6)$$

---

<sup>1</sup>El teorema de Green para las funciones  $\phi(\mathbf{r})$  y  $\psi(\mathbf{r})$  establece que:

$$\int_V (\phi\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\phi)dV = \int_S (\phi\partial_n\psi - \psi\partial_n\phi)dS.$$

Teniendo en cuenta que:

$$\nabla\psi \cdot d\mathbf{s} = \nabla\psi \cdot \mathbf{n} ds = \partial_n\psi ds.$$

Por lo que (5.1.5) se transforma en:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V G_D(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') dV' - \frac{1}{4\pi} \oint_S \Phi(\mathbf{r}') \frac{\partial G_D(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} dS'. \quad (5.1.7)$$

Por otro lado para el caso de las condiciones de contorno *Neumann* se tiene que:

$$\frac{\partial G_N}{\partial n'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \quad \forall \mathbf{r}' \in S. \quad (5.1.8)$$

Este problema se debe analizar con más cuidado. Para ello, aplicamos el teorema de la divergencia a (5.1.2) y obtenemos que:

$$\oint_S \frac{\partial G_N}{\partial n'} dS' = -4\pi. \quad (5.1.9)$$

En consecuencia:

$$\frac{\partial G_N}{\partial n'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{4\pi}{S}, \quad \forall \mathbf{r}' \in S. \quad (5.1.10)$$

Por lo que (5.1.5) se transforma en:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \langle \Phi \rangle_S + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V G_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') dV' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}')}{\partial n'} G_N dS', \quad (5.1.11)$$

donde  $\langle \Phi \rangle_S$  representa el valor medio del potencial  $\Phi(\mathbf{r})$  en la superficie  $S$ .

**Interpretación de la función de Green: Método de las imágenes** El método de las imágenes se indica para la resolución de problemas electrostáticos en los que se desea determinar el potencial eléctrico en un cierto volumen  $V$ . Este potencial es creado por una distribución de carga dada, tal que se cumplen determinadas condiciones de contorno sobre la superficie  $S$ , que encierra el volumen  $V$ . El método se basa en sustituir las condiciones frontera por cargas, fuera del volumen  $V$ , que crean un campo eléctrico tal que sustituyen a las condiciones de contorno. Estas cargas se denominan *Cargas imágenes*. Ejemplos sencillo de dicho procedimiento se pueden encontrar en [21]. A continuación, veamos su estrecha relación con el método de las funciones de Green.

La función de Green en su modo más simple  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ , se puede interpretar como el potencial creado por una carga puntual, considerando una distribución de carga igual a  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . Sin embargo, como hemos visto antes, también debemos considerar la cantidad  $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , que es solución a la ecuación de Laplace en el interior del volumen  $V$ . Este término está relacionado con las condiciones de contorno, dado que como se pueden observar en (5.1.7) y en (5.1.11), existe un término análogo al visto en capítulos anteriores y otro término asociado a las condiciones de contorno. Por lo tanto, de (5.1.4) se deduce que el término  $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  se puede interpretar como el potencial creado por las **cargas imágenes**, tal que se verifiquen las condiciones de contorno. En consecuencia, representa el potencial de un sistema de cargas externo al volumen  $V$ .

### 5.1.1. Esfera conductora

Consideremos ahora un ejemplo del problema de *Dirichlet*, con el objetivo de aplicar todo lo anterior. Nuestro objetivo es obtener el potencial  $\Phi(\mathbf{r})$  creado por una carga  $q_0$ , localizada en el punto  $P$ . El correspondiente vector de posición de este punto  $\mathbf{r}'$  se localiza fuera de una esfera conductora de radio  $a$ , que se encuentra a potencial cero. Todo esto se muestra en la Figura 5.1.

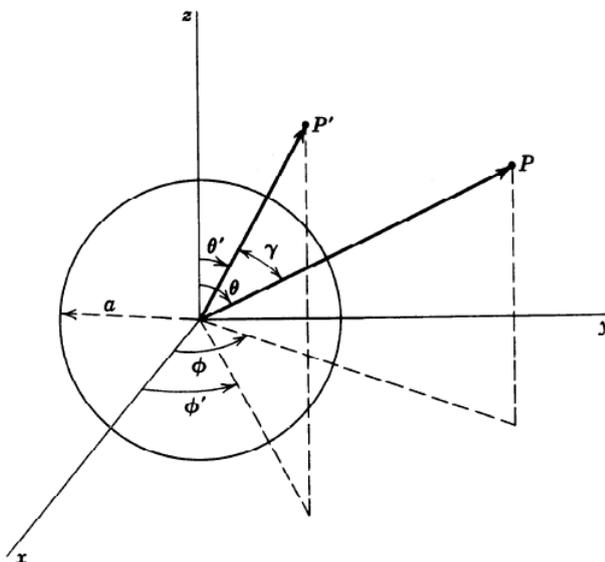


Figura 5.1: Esfera conductora y carga puntual  $q_0$ .

Recurriremos al método de las imágenes para obtener la función de Green. Como consecuencia de la simetría del sistema, la carga imagen  $q'$  se localiza ( $\mathbf{r}''$ ) sobre la recta que une la carga  $q_0$  con el origen. La correspondiente función de Green se escribe de la siguiente manera:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{q_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{q'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|}. \quad (5.1.12)$$

Teniendo en cuenta que debemos definir  $q'$  y  $\mathbf{r}''$  de tal forma que  $G(|\mathbf{r}| = a, \mathbf{r}') = 0$ , podemos escribir:

$$q' = -\frac{a}{r'}q_0, \quad r'' = \frac{a^2}{(r')^2}. \quad (5.1.13)$$

Por lo tanto, tenemos que la función de Green:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{q_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{aq_0}{r'|\mathbf{r} - \frac{a^2}{r'^2}\mathbf{r}'|}. \quad (5.1.14)$$

Por otro lado, la simetría del problema sugiere la utilización de coordenadas esféricas:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{q_0}{(r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \gamma)^{1/2}} - \frac{q_0}{\left(\frac{x^2 r'^2}{a^2} + a^2 - 2rr' \cos \gamma\right)}. \quad (5.1.15)$$

Donde  $\gamma$  es el ángulo entre  $\mathbf{r}'$  y  $\mathbf{r}$ , i.e:

$$\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \phi'). \quad (5.1.16)$$

Recordemos que el potencial viene dado por (5.1.7):

$$\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_S \Phi(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} dS'. \quad (5.1.17)$$

Luego consideremos los siguientes casos:

▪  $r < a$ :

$$\left. \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \right|_{r'=a} = \frac{q_0(r^2 - a^2)}{a(r^2 + a^2 - 2ar \cos \gamma)^{3/2}}. \quad (5.1.18)$$

▪  $r > a$ :

$$\left. \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \right|_{r'=a} = -\frac{q_0(r^2 - a^2)}{a(r^2 + a^2 - 2ar \cos \gamma)^{3/2}}. \quad (5.1.19)$$

Por lo tanto, ya podemos evaluar el potencial eléctrico en el interior y exterior de la esfera. Para el interior de la esfera:

$$\begin{aligned} \Phi_{<}(\mathbf{r}) &= -\oint_S \frac{1}{4\pi} \Phi_s(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} dS' = \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{q_0 a (a^2 - r^2)}{(r^2 + a^2 - 2ar \cos \gamma)^{3/2}} \Phi_s(\theta', \phi') d\Omega' \\ &= \frac{q_0 a (a^2 - r^2)}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' \frac{\Phi_s(\theta', \phi')}{(r^2 + a^2 - 2ar \cos \gamma)^{3/2}}, \quad r < a. \end{aligned} \quad (5.1.20)$$

donde  $d\Omega' = \sin \theta' d\theta' d\phi'$  y  $\Phi_s(\mathbf{r}') = \Phi(a, \phi', \theta')$  es el potencial sobre la superficie de la esfera. Y para el exterior de la esfera:

$$\Phi_{>}(\mathbf{r}) = \frac{q_0 a (r^2 - a^2)}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' \frac{\Phi_s(\theta', \phi')}{(r^2 + a^2 - 2ar \cos \gamma)^{3/2}}, \quad r > a. \quad (5.1.21)$$

## 5.2. Potenciales de retardo

Finalmente, en este último apartado analizaremos las ecuaciones de Maxwell a través de los potenciales electrodinámicos, con el objetivo de obtener los potenciales de retardo. El procedimiento a seguir es análogo al presentado en [23]. Sea  $\phi(\mathbf{r}, t)$  el potencial eléctrico escalar y sea  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  el potencial vector magnético. Entonces,

las ecuaciones de Maxwell se pueden escribir en términos de dichos potenciales de la siguiente manera:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \nabla^2 \phi = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\varepsilon_0} + \frac{\partial}{\partial t} \left( \nabla \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right). \quad (5.2.1)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) - \nabla \left( \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right). \quad (5.2.2)$$

Si escogemos el gauge *Lorenz-Lorentz*:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0, \quad (5.2.3)$$

siendo  $c$  la velocidad de la luz, la cual es fijada por dicho gauge. Las ecuaciones acopladas (5.2.1) y (5.2.2) se transforman en el siguiente sistema de ecuaciones de onda inhomogéneas no acopladas:

$$\square^2 \phi \equiv \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \phi(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\varepsilon_0}. \quad (5.2.4)$$

$$\square^2 \mathbf{A} \equiv \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \quad (5.2.5)$$

Luego, las ecuaciones anteriores tiene la forma:

$$\square^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t), \quad (5.2.6)$$

donde la función  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  se corresponde a los potenciales y la función  $f(\mathbf{r}, t)$  a las fuentes. Para determinar la solución a estas ecuaciones procederemos mediante el método de Green. Luego, comencemos considerando la trasformada de Fourier respecto del tiempo, de la función fuente:

$$\mathcal{F}\{f(\mathbf{r}, t)\} \equiv f_\omega(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}, t) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (5.2.7)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\{f_\omega(\mathbf{r})\} \equiv f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_\omega(\mathbf{r}) e^{i\omega t} d\omega, \quad (5.2.8)$$

y de los potenciales:

$$\Psi_\omega(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\mathbf{r}, t) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (5.2.9)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_\omega(\mathbf{r}) e^{+i\omega t} d\omega. \quad (5.2.10)$$

Y teniendo en cuenta la relación de dispersión  $\omega = ck$ , la ecuación (5.2.6) se transforma:

$$\nabla^2 \Psi_\omega(\mathbf{r}) + k^2 \Psi_\omega(\mathbf{r}) = -f_\omega(\mathbf{r}), \quad (5.2.11)$$

que es la ecuación de *Helmholtz* inhomogénea tridimensional. Por lo tanto, la función de Green asociada a esta ecuación es:

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (5.2.12)$$

Considerando el sistema de coordenadas esféricas ( $r = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ ) y operando, la ecuación se transforma en:

$$\frac{d^2}{dr^2} (rG(r)) + k^2 rG(r) = r\delta(r). \quad (5.2.13)$$

Dado que el sistema posee simetría esférica la solución solamente depende de  $r$  y no de  $\theta$  y  $\phi$ . Para resolver esta ecuación, consideremos en primer lugar la solución a la ecuación inhomogénea, es decir, la solución cuando  $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ :

$$\frac{d^2}{dr^2} (rG(r)) + k^2 rG(r) = 0, \quad (5.2.14)$$

cuya solución es:

$$G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = C^+ \frac{e^{ikr}}{r} + C^- \frac{e^{-ikr}}{r} = C^+ \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + C^- \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (5.2.15)$$

Para determinar las constantes  $C^\pm$ , sustituimos la solución (5.2.15) en (5.2.6) e integramos sobre un pequeño volumen próximo a  $r = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = 0$ . Por lo tanto, cuando  $r \rightarrow 0$  podemos aproximar la función de Green por:

$$G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \simeq C^+ \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + C^- \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (5.2.16)$$

Y considerando la integral sobre un pequeño volumen  $\tau'$  de radio  $r$  próximo al origen:

$$(C^+ + C^-) \int_{\tau'} \nabla^2 \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) d^3 \mathbf{r}' + k^2 (C^+ + C^-) \int_{\tau'} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r}' = \int_{\tau'} \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d^3 \mathbf{r}'.$$

Tomando  $r \rightarrow 0$  el volumen  $\tau' \rightarrow 0$ . Por lo tanto se tiene que la segunda integral desaparece y la primera integral es igual a  $-4\pi$  (consultar propiedades de la delta de Dirac). Tenemos entonces que:

$$C^+ + C^- = -\frac{1}{4\pi}. \quad (5.2.17)$$

Como bien sabemos la solución a la ecuación (5.2.6) es:

$$\Psi_\omega(\mathbf{r}) = - \int_V f_\omega(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV'. \quad (5.2.18)$$

Y por lo tanto:

$$\Psi_{\omega}(\mathbf{x}) = C^+ \int_V f_{\omega}(\mathbf{r}') \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dV' + C^- \int_V f_{\omega}(\mathbf{r}') \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dV'. \quad (5.2.19)$$

Para obtener la solución a (5.2.6) tenemos que calcular la transformada de Fourier inversa respecto del tiempo:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) = & C^+ \int_V dV' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_{\omega}(\mathbf{r}') \frac{\exp \left[ i\omega \left( t - \frac{k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{\omega} \right) \right]}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \\ & + C^- \int_V dV' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_{\omega}(\mathbf{r}') \frac{\exp \left[ i\omega \left( t + \frac{k|\mathbf{r}+\mathbf{r}'|}{\omega} \right) \right]}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \end{aligned} \quad (5.2.20)$$

Por lo tanto podemos introducir los tiempos de retardo  $t'_{ret}$  y los tiempos de adelanto  $t'_{ad}$ :

$$t'_{ret} = t'_{ret}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, t) = t - \frac{k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{\omega} = t - \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{c}, \quad (5.2.21)$$

$$t'_{ad} = t'_{ad}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, t) = t + \frac{k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{\omega} = t + \frac{|\mathbf{r}+\mathbf{r}'|}{c}, \quad (5.2.22)$$

donde hemos hecho uso de la relación de dispersión  $\omega = ck$ . Finalmente, se tiene que la solución a (5.2.6) es:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = C^+ \int_V dV' \frac{f(\mathbf{r}, t'_{ret})}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - C^- \int_V dV' \frac{f(\mathbf{r}, t'_{ad})}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (5.2.23)$$

Por lo tanto tenemos que la solución se puede expresar como la suma de dos términos. El primero determina la forma del campo en el instante  $t$  y en la posición  $\mathbf{r}$ , debido a la fuente en el instante  $t'_{ret}$  anterior a  $t$ . De la misma forma, el segundo término determina la forma del campo debido al efecto de la fuente en un instante  $t'_{ad}$  después de  $t$ . Esta última solución no es físicamente aceptable, pues como ya bien sabemos incumple el principio de causalidad y por lo tanto supondremos que  $C^- = 0$ . Finalmente, identificando  $f(\mathbf{r}, t)$  con la densidad de carga  $\rho(\mathbf{r}, t)$  y la distribución de corriente  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  obtenemos, respectivamente, los potenciales de retardo:

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V \frac{\rho(\mathbf{r}', t'_{ret})}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dV'. \quad (5.2.24)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}', t'_{ret})}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dV'. \quad (5.2.25)$$

Recuérdese que en las expresiones anteriores se está considerando el tiempo de retardo y el vector de posición  $\mathbf{r}'$ .

# 6

## Conclusiones

A lo largo del presente trabajo hemos calculado las respectivas funciones de Green asociadas a las principales ecuaciones que se encuentran en Física. Como bien sabemos, el potencial de esta técnica radica en que la solución al problema inhomogéneo particular se expresa como una integral. En consecuencia, las funciones de Green son independientes de la forma del término inhomogéneo. Por ello, únicamente nos hemos limitado a determinar la función de Green sin resolver el problema estrictamente, es decir, encontrar la solución a la ecuación diferencial inhomogénea. Esto se debe a la diversidad de términos inhomogeneos que podemos encontrar en los diferentes sistemas físicos, lo cual nos obligaría a analizar problemas muy específicos.

En este sentido, la forma de función de Green asociada a un problema físico concreto depende del sistema de coordenadas en el que trabajemos, así como de las condiciones de contorno que consideremos. Por ello, a cada problema físico podemos encontrar infinitud de funciones de Green asociadas, en consonancia con sus características específicas. Sin embargo, en nuestro estudio hemos procurado centrarnos en las condiciones más frecuentes, de tal forma que los resultados sean de interés. Por ello, el lector puede hallar en este trabajo un “pequeño manual” de consulta en el que podrá encontrar la función de Green específica y resolver, seguidamente, el problema inhomogéneo asociado.

En cuanto a la resolución de una ecuación diferencial ordinaria de tipo Sturm-Liouville se ha conseguido exponer un procedimiento para su obtención, así como una expresión en series de autofunciones. De esa forma, se ha expuesto su aplicación puramente matemática.

Esta técnica es de gran utilidad en el caso del oscilador armónico para oscilaciones libres y amortiguados. Esto se debe a que podemos resolver multitud de problemas

caracterizados cada uno de ellos por una fuerza externa diferente. Por otro lado, en el caso de la ecuación del calor y la ecuación de ondas hemos tenido que abordar el problema de forma más específica a través de ciertas condiciones de contorno.

En el caso de los sistemas cuánticos hemos conseguido exponer el formalismo de las funciones de Green relativo a la ecuación de Schrödinger independiente y dependiente del tiempo. En ambos casos, hemos encontrado una expresión para la función (operador) de Green en forma de serie de autofunciones del Hamiltoniano. Por lo tanto, la función de Green del sistema se obtiene resolviendo el problema de autovalores y autoestados del operador Hamiltoniano. Además, hemos considerado dos ejemplos de construcción de dichas funciones de Green: partícula libre y oscilador armónico. En el caso de la función de Green dependiente del tiempo también podemos utilizar el formalismo de la integral de caminos para su construcción.

Finalmente, hemos introducido esta técnica en la resolución de problemas relacionados con la teoría electromagnética, donde lo que hoy denominamos funciones de Green aparecieron por primera vez. En el estudio de la ecuación de Poisson hemos conseguido dar una interpretación física a la función de Green mediante el conocido método de las imágenes. Finalmente, hemos logrado resolver la ecuación de Helmholtz para la obtención de los potenciales de retardo.

# Bibliografía

- [1] M. Gadella y L. M. Nieto, *Métodos matemáticos avanzados para Ciencias e Ingenierías*, Servicio de Publicaciones de la Universidad de Valladolid, 2000.
- [2] S. Bravo Yuste, *Métodos matemáticos avanzados para científicos e Ingenieros*, Universidad de Extremadura, 2006.
- [3] A. García, F. García, A. López, G. Rodríguez y A. Villa, *Ecuaciones diferenciales ordinarias: Teoría y Problemas*, CLAG, 2006.
- [4] Y. Pinchover, *Ecuaciones diferenciales ordinarias: Teoría y Problemas*, Cambridge University Press, 2005.
- [5] P. K. Kythe, *Green's Functions and Linear Differential Equations: Theory, Applications, and Computation*, Chapman and Hall/CRC, 2011.
- [6] J. E. Marsden and M. J. Hoffman, *Basic Complex Analysis*, Bedford ST Martins, 1998.
- [7] G. F. Roach, *Green's Functions: introductory theory with application*, Van Nostrand Reinhold Inc., 1970.
- [8] S. Wolfram, *The Mathematica Book*, Wolfram Media, 2003.
- [9] T. Rother, *Green's Functions in Classical Physics*, Springer International Publishin, 2017.
- [10] D. G. Duffy, *Green's Functions with Applications*, Chapman and Hall/CRC, 2018.
- [11] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer-Verlag, 1990.
- [12] R. G. Littlejohn, *Green's Functions in Quantum Physics*, Lecture Notes, University of Berkeley, 2012.
- [13] M. Alonso and H. Valk, *Quantum Mechanics: Principles and Applications*, Addison-Wesley, 1974.
- [14] S. Blugel, *Scattering Theory: Born Series*, Lecture manuscripts of the Spring School of the Institute of Solid State Research, 2012.

- [15] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Quantum Mechanics, vols I y II*, Wiley-VCH, 1977.
- [16] M. L. Glasser and L. M. Nieto, *The energy level structure of a variety of one-dimensional confining potentials and the effects of a local singular perturbation*, Can. J. Phys. **93** (2015) 1588-1596.
- [17] M. L. Glasser, *An integral representation for the product of two parabolic cylinder functions having unrelated arguments*, Integral Transforms Spec Funct. **26** (2015) 825–828.
- [18] A. Erdelyi, *The Bateman Project: Higher Transcendental Functions. Vol. II*. McGraw-Hill Book Company, 1953.
- [19] R. P. Feynman y A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integral*, Dover Books, 2010.
- [20] M. E. Peskin, D. V. Schroeder *An Introduction to Quantum Field Theory*, Addison-Wesley, 1995.
- [21] J. D Jackson, *Classical Electrodynamics*, John Wiley and Sons Ltd, 1998.
- [22] J. Costa, F. L. Aguilar, *Interacción electromagnética: teoría clásica*, Editorial Reverte, 2007.
- [23] B. Thidé, *Electromagnetic Field Theory*, Upsilon Media, 2000.