

# Análisis de hamiltonianos cuánticos unidimensionales dependientes del tiempo

Trabajo de Fin de Grado

Autor:

Daniel Martín Gómez

23 de Julio de 2019



---

**Universidad de Valladolid**

Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica

Tutor:

Luis Miguel Nieto Calzada



# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>III</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	1
1.2. Pozo infinito . . . . .	3
1.3. Planteamiento general del problema . . . . .	5
1.4. Distribución de los capítulos . . . . .	7
<b>2. Ejemplo de potencial impulsivo</b>	<b>9</b>
2.1. Resolución de la ecuación del calor con un término impulsivo . . . . .	9
2.2. Resolución del potencial cuántico impulsivo por medio de la transformada de Laplace . . . . .	15
2.2.1. Resolución con una condición inicial particular . . . . .	18
2.2.2. El estado fundamental del pozo infinito . . . . .	18
2.2.3. Los estados pares del pozo infinito . . . . .	19
2.2.4. Los estados impares del pozo infinito . . . . .	20
2.3. Resolución del potencial cuántico impulsivo por medio de series de Fourier	21
2.4. Un modelo cuántico impulsivo simplificado . . . . .	23
<b>3. Coeficiente general dependiente del tiempo</b>	<b>27</b>

3.1. Planteamiento del problema . . . . .	27
3.2. Resolviendo la ecuación . . . . .	30
3.3. Alguna solución particular . . . . .	32
<b>4. Conclusiones</b>	<b>35</b>

# Resumen

En este trabajo se plantea obtener soluciones analíticas exactas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con potenciales que incluyen una delta de Dirac en la posición. Para ello, se utilizan técnicas matemáticas como la transformada de Laplace o las series de Fourier. En primer lugar se considera un coeficiente temporal impulsivo y se obtiene la solución exacta. La solución no posee una forma habitual, así que se analiza la solución obtenida mediante un potencial independiente de la posición. Por último, se considera el problema con una dependencia temporal genérica y se hallan las infinitas ecuaciones diferenciales que conducen a la solución.

# Abstract

In this work, for potentials that include a Dirac delta function in the position, exact analytical solutions of the time dependent Schrödinger equation are set out to obtain. To accomplish this goal, mathematical techniques like the Laplace transform or the Fourier series are used. A temporal impulsive coefficient is taken and the exact solution is obtained in this case. The solution does not possess an habitual form, so this result is analysed by means of an independent position potential. Finally, the problem for a generic temporal dependence is considered, and a system of infinite coupled ordinary differential equations, leading to the solution, is found.



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación

La ecuación de Schrödinger en una dimensión espacial, cuya forma es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}, \quad (1.1)$$

permite hallar la función de onda unidimensional para partículas cuánticas no relativistas. Habitualmente, se suelen estudiar potenciales de la forma

$$V(x, t) = V(x),$$

es decir, potenciales que únicamente dependen de la posición. Sin embargo, los problemas en los que el potencial depende tanto de la posición como del tiempo (objetos de esta investigación) son los más interesantes, pues su estudio ha sido bastante menos extenso, en parte porque la inclusión de la dependencia temporal complica bastante los cálculos necesarios. Habitualmente, se calculan las soluciones a este tipo de problemas de forma numérica. Sin embargo, en este trabajo se pretende conseguir una solución analítica a problemas concretos.

Antes de comenzar, se va a explicar brevemente parte de los trabajos que han sido publicados acerca de este tema, para observar el desarrollo de estos problemas en la actualidad.

En [1], se estudia una partícula en una caja infinita unidimensional, es decir, con condiciones de contorno, en la que el potencial es de la forma

$$V(x, t) = 2c(t)\delta(x - x_0).$$

Como condición inicial, se utilizan los estados ligados de la caja sin potencial, que discutiremos posteriormente. La expresión obtenida a partir del formalismo de la trans-

formada de Laplace se particulariza para el caso

$$c(t) = \tan(k^2 t/4),$$

y se calcula la solución numéricamente. El problema tiene una orientación termodinámica, pues intenta simular un condensado de Bose-Einstein en una trampa óptica formando una caja unidimensional, con un rayo láser actuando como la delta de Dirac.

En [2], se estudia una partícula en un pozo cuadrado infinito unidimensional con una pared móvil, que implica una condición de contorno dependiente del tiempo, y tomando como condición inicial uno de los estados propios del pozo sin potencial, con frecuencia propia  $\omega_0$ . Posteriormente, se aplica a tres tipos distintos de desplazamiento: una pared que se contrae de manera lineal, una pared que oscila armónicamente, y una pared oscilante con parámetros ajustables (anchura mínima del pozo, amplitud y frecuencia). En este último caso, se obtienen tres comportamientos dependientes de la frecuencia: un régimen de baja frecuencia ( $\omega \ll \omega_0$ ) con movimiento periódico y adiabático; un régimen de alta frecuencia ( $\omega \gg \omega_0$ ) con movimiento periódico pero no adiabático; y un régimen caótico para frecuencias intermedias.

En [3], se plantea el pozo infinito cuadrado unidimensional sin potencial, y se transforma en un pozo infinito cuadrado con una barrera móvil mediante una transformación puntual. Posteriormente, se aplica una transformación supersimétrica (SUSY) dependiente del tiempo para generar un sistema de un potencial Pöschl-Teller con una barrera móvil, permitiendo resolver el problema en términos de funciones especiales. Por último, se aplica otro tipo de transformación supersimétrica al pozo infinito cuadrado con una barrera móvil para obtener una familia biparamétrica de pozos de potencial infinitos cuadrados con una barrera móvil. Para todos los sistemas se presentan soluciones a la ecuación de Schrödinger unidimensional dependiente del tiempo correspondiente a cada caso.

En [4], se estudia el scattering de partículas de Dirac sin masa en una dimensión espacial a través de una barrera de potencial dependiente del tiempo, con la dependencia espacial aproximada a una delta de Dirac. Utilizando la teoría de Floquet, se expresan las amplitudes de transmisión obtenidas en términos de las funciones de Bessel. Posteriormente, se calcula para electrones de Dirac sin masa cuya dependencia temporal del potencial es armónica, de forma arbitraria. Se obtiene que las amplitudes de transmisión son independientes de la energía entrante y, en el caso de que la barrera sea muy pronunciada, también son independientes de la frecuencia entrante.

En [5], se estudia la amplitud de transmisión de partículas en una dimensión a través de una barrera delta oscilante en el tiempo. Para ello, se obtiene a través del teorema de Floquet la forma de la amplitud de transmisión, demostrando que posee una estructura de fracción continua. Esta permite estudiar las propiedades de los polos de la amplitud, como la localización y comportamiento casi periódico de las resonancias



de polo cero de la transmisión, la existencia de bandas no resonantes, la dependencia de los residuos de los polos con la energía y la existencia de las “anomalías umbrales” que se observan al representar las curvas de la transmisión frente a la energía.

En [6], se encuentra una solución exacta al problema semiclásico de transferencia unidimensional de dos potenciales función  $\delta$  aproximándose con velocidad uniforme. El potencial de este problema posee la forma

$$V(x, t) = -\frac{\hbar^2}{m} [\alpha_1 \delta(x - v_1 t) + \alpha_2 \delta(x - v_2 t)].$$

Para resolverlo, se utiliza un método similar al de las imágenes de Kelvin en electrostática, resolviendo solo una de las  $\delta$  y usando esa solución para encontrar la de la segunda. Posteriormente, se calcula la probabilidad de transición de la reacción en el sistema centro de masas de la colisión elástica de los agregados nucleares pesados representados por los pozos de potencial formados con las deltas.

En [7], se calcula mediante la transformada de Laplace el propagador de varios potenciales unidimensionales que involucran funciones  $\delta$  (o sus derivadas) acompañadas de coeficientes dependientes del tiempo. Primero, se halla el propagador en el dominio de Laplace para un conjunto finito de deltas, es decir, con potencial

$$V(x, t) = \sum_{i=1}^N \lambda_i(t) \delta(x - x_i).$$

Además, se particulariza para el caso de una única delta, donde el coeficiente  $\lambda(t)$  toma la forma de una constante y de

$$\lambda(t) = \alpha/t,$$

permitiendo realizar la transformada inversa del propagador. Después, tomando los coeficientes  $\lambda_j$  como constantes en el caso general se hace tender los argumentos de las deltas a infinito para poder eliminar las correlaciones entre ellas. De esta forma se obtiene el propagador para el caso de  $N$  deltas. Por último, se repite el mismo procedimiento para el caso de un potencial

$$V(x, t) = \sum_{i=1}^N \lambda_i(t) \delta'(x - x_i),$$

es decir, dependiente de la derivada de la delta.

## 1.2. Pozo infinito

En esta sección se va analizar la resolución de la ecuación de Schrödinger en un pozo infinito de potencial siguiendo [8]. El objetivo es obtener las autofunciones del problema, las cuales se utilizarán más adelante.

En el caso de que  $V(x, t) = V(x)$ , es decir, el potencial sea independiente del tiempo, se puede buscar una solución para la ecuación (1.1) de modo que

$$\psi(x, t) = \varphi(x)\chi(t). \quad (1.2)$$

Separando variables se obtiene una ecuación para la posición de la forma:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E \varphi(x). \quad (1.3)$$

En el problema a estudiar (el pozo infinito de potencial) la forma del potencial es

$$V(x) = 0, \quad (1.4)$$

luego manipulando la ecuación (1.3) adecuadamente, esta adopta la forma:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0. \quad (1.5)$$

Introduciendo una constante positiva  $k$  definida como

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.6)$$

y planteando un pozo de anchura  $a$  y comprendido en el intervalo  $[0, a]$  (es decir,  $\varphi(x)$  será nula para  $x \leq 0$  y  $x \geq a$ ) quedan un conjunto de soluciones de la forma

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left( \frac{n\pi x}{a} \right), \quad (1.7)$$

con energías

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (1.8)$$

Para trabajar posteriormente se va a omitir el término de normalización de la expresión (1.7), de forma que quede

$$\varphi_n(x) = \operatorname{sen} \left( \frac{n\pi x}{a} \right). \quad (1.9)$$

Este resultado es válido para el intervalo  $[0, a]$ . Sin embargo, en este trabajo por simplicidad se utilizará el intervalo  $[-1, 1]$ . Para modificar el resultado obtenido, se deben utilizar dos cambios de variable:

$$2x - a = x', \quad a = 1. \quad (1.10)$$

Aplicando estos cambios a (1.9), la expresión de las autofunciones queda:

$$\varphi_n(x') = \operatorname{sen} \left( \frac{n\pi(x' + 1)}{2} \right), \quad (1.11)$$

y desarrollando el seno:

$$\varphi_n(x') = \text{sen} \left( \frac{n\pi}{2} \right) \cos \left( \frac{n\pi}{2} x' \right) + \cos \left( \frac{n\pi}{2} \right) \text{sen} \left( \frac{n\pi}{2} x' \right). \quad (1.12)$$

Si se escoge un  $n$  par, es decir,  $n = 2m$ , obviando los coeficientes se tiene una autofunción de la forma:

$$\varphi_{2m}(x') = \text{sen}(m\pi x'). \quad (1.13)$$

Una representación gráfica se muestra en la Figura 1.1.

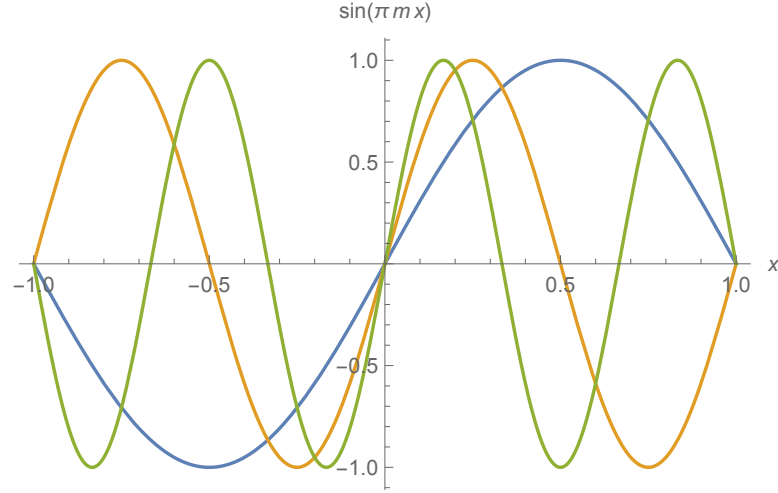


Figura 1.1: Tres primeros autoestados con  $n$  par,  $\varphi_{2m}$  en (1.13).

A su vez, si se escoge  $n$  impar ( $n = 2m + 1$ ), la autofunción resultante obviando coeficientes es:

$$\varphi_{2m+1}(x') = \cos \left( \frac{(2m+1)\pi}{2} x' \right). \quad (1.14)$$

Una representación gráfica de estas autofunciones aparece en la Figura 1.2.

Por último, el estado fundamental del pozo será aquel con  $n = 1$ , es decir:

$$\varphi_1(x') = \cos \left( \frac{\pi}{2} x' \right). \quad (1.15)$$

Las autofunciones (1.13) y (1.14) se utilizarán en apartados posteriores.

### 1.3. Planteamiento general del problema

Consideremos un pozo de potencial infinito unidimensional, de anchura  $2a$ , centrado en  $x = 0$ , que justamente en ese punto tiene un término adicional que es una delta de Dirac con un coeficiente que depende del tiempo:  $\beta(t)\delta(x)$ , donde  $\beta(t)$  es una función

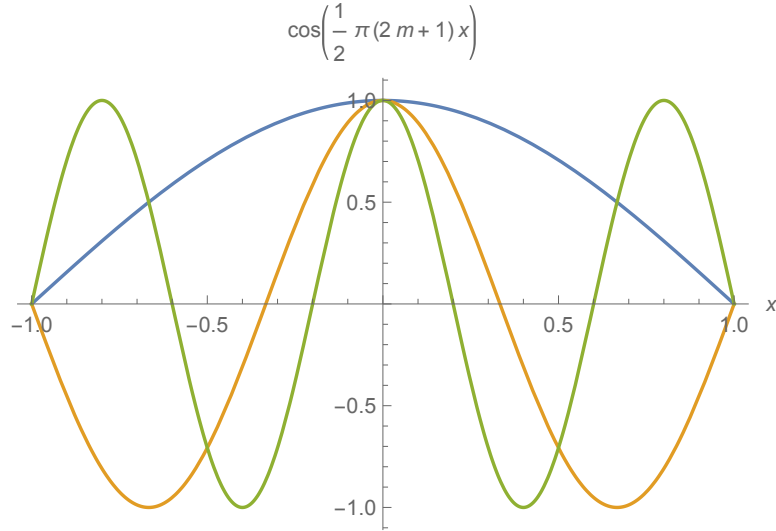


Figura 1.2: Tres primeros autoestados con  $n$  impar,  $\varphi_{2m+1}$  en (1.14).

conocida que solo depende del tiempo. La forma de la ecuación de Schrödinger para este problema será:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \beta(t) \delta(x) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}, \quad x \in [-a, a], \quad t \in \mathbb{R}. \quad (1.16)$$

Fuera del intervalo abierto  $(-a, a)$  la función de onda  $\psi(x, t)$  es idénticamente nula para todo instante de tiempo. En concreto para los extremos del intervalo  $x = \pm a$  se tiene:

$$\psi(\pm a, t) = 0, \quad \forall t \in \mathbb{R}. \quad (1.17)$$

Para simplificar la ecuación (1.16), se realizarán los siguientes cambios de variable:

$$x = a\xi, \quad \xi \in [-1, 1], \quad (1.18)$$

$$t = b\tau, \quad \tau \in \mathbb{R}. \quad (1.19)$$

Con esto la ecuación toma la forma:

$$\frac{\partial^2 \phi(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} + i \frac{\partial \phi(\xi, \tau)}{\partial \tau} = g(\tau) \delta(\xi) \phi(0, \tau), \quad \xi \in [-1, 1], \quad \tau \in \mathbb{R}, \quad (1.20)$$

siendo

$$\phi(\xi, \tau) = \psi(x, t), \quad g(\tau) = \frac{2ma}{\hbar^2} \beta(b\tau), \quad b = \frac{2ma^2}{\hbar} > 0, \quad (1.21)$$

que debe cumplir las condiciones de contorno de Dirichlet si queremos que la mencionada función sea continua en los extremos del intervalo

$$\phi(\pm 1, \tau) = 0, \quad \forall \tau \in \mathbb{R}. \quad (1.22)$$

Es más, debe ser tal que  $\phi(\xi, \tau) = 0, \forall \xi \notin (-1, 1)$  y  $\forall \tau \in \mathbb{R}$ . Además deberá imponerse una condición inicial del tipo

$$\phi(\xi, 0) = f(\xi), \quad \xi \in [-1, 1], \quad (1.23)$$

donde  $f(\xi)$  es conocida y cumple  $f(\pm 1) = 0$ .

Por otro lado, la presencia de la  $\delta(\xi)$  en la ecuación (1.20) implica que, suponiendo  $\phi(\xi, \tau)$  continua, su derivada parcial primera respecto de  $\xi$  no puede ser continua en el origen, siendo el salto en la mencionada derivada parcial en el origen

$$\Delta\phi_\xi(0) := \phi_\xi(0^+, \tau) - \phi_\xi(0^-, \tau) = g(\tau)\phi(0, \tau). \quad (1.24)$$

## 1.4. Distribución de los capítulos

En el estudio se van a diferenciar dos capítulos, que comprenderán dos problemas distintos.

En el Capítulo 2 se realizará un ejemplo concreto con un potencial impulsivo del tipo  $V(\xi, \tau) = k \delta(\tau - \tau_0) \delta(\xi)$ . Primero, se resolverá la ecuación del calor con ese potencial para tener un ejemplo sencillo de comparar. Después, se resolverá la ecuación de Schrödinger (1.20) con el potencial impulsivo mediante dos procedimientos: la transformada de Laplace y el desarrollo de Fourier. Por último, a la vista de los resultados obtenidos y de la dificultad para explicarlos, se simplificará el coeficiente impulsivo eliminando su dependencia espacial, con el objetivo de obtener alguna pista que sugiera lo que ocurre en la ecuación.

En el Capítulo 3, se intentará resolver la ecuación (1.20) con un coeficiente general por el método de Fourier. Se llegará a un sistema de infinitas ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas, las cuales no se resolverán explícitamente.

Por último, en el Capítulo 4 se resumirán las conclusiones alcanzadas a lo largo del desarrollo del presente trabajo.



# Capítulo 2

## Ejemplo de potencial impulsivo

En este capítulo se va a sustituir el coeficiente  $g(\tau)$  por  $k\delta(\tau - \tau_0)$ . Este factor da cuenta de un potencial impulsivo, es decir, que solo se encuentra activo en un momento determinado del tiempo ( $\tau_0$ ), y en el resto es nulo. Primero se resolverá la ecuación del calor con este coeficiente, pues presenta cierto paralelismo con la ecuación de Schrödinger. El objetivo es obtener una solución que permita una mejor interpretación de la situación que se obtendrá cuando se resuelva la ecuación cuántica, que es lo que se realiza en el siguiente apartado. La resolución de la ecuación de Schrödinger se efectúa mediante dos métodos usuales en la resolución de este tipo de ecuaciones diferenciales: la transformación de Laplace y las series de Fourier. Puesto que los resultados que se obtienen no son fácilmente interpretables, se realizará por último una simplificación del potencial, de modo que

$$V(\xi, \tau) = V(\tau), \quad (2.1)$$

es decir, se elimina la dependencia espacial, con el fin de obtener una expresión que indique qué puede estar ocurriendo en el caso más general.

### 2.1. Resolución de la ecuación del calor con un término impulsivo

Para empezar, se va a resolver la ecuación del calor con fuentes, pues presenta cierta analogía con la ecuación de Schrödinger y permitirá hacerse una idea del comportamiento de la solución. En este caso particular, se ha decidido que el coeficiente  $g(t)$  posea la forma:

$$g(t) = k\delta(t - t_0), \quad k \neq 0, \quad t_0 > 0. \quad (2.2)$$

De esta forma, se tiene una especie de perturbación instantánea de tipo impulsivo, y la ecuación diferencial en derivadas parciales (EDP) a resolver será:

$$u_{xx}(x, t) = u_t(x, t) + k\delta(x)\delta(t - t_0) \quad (2.3)$$

con  $t_0 > 0$  y condiciones de contorno  $u(\pm 1, t) = 0$ . Como ejemplo particular, se utilizará el estado fundamental de la partícula libre en un pozo unidimensional como condición inicial, es decir, (1.15):

$$u(x, 0) = \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right). \quad (2.4)$$

Para resolver este tipo de problemas, primero se debe resolver primero la ecuación homogénea asociada, que tiene la forma

$$u_{xx}^h(x, t) = u_t^h(x, t), \quad x \in [-1, 1], \quad t \in \mathbb{R}, \quad u^h(\pm 1, t) = 0. \quad (2.5)$$

Este problema se resuelve por el método de separación de variables: se supone que  $u^h(x, t) = X(x)T(t)$  y se sustituye en (2.5), de modo que tras operar se llega a

$$\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} = \frac{1}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = -\lambda, \quad (2.6)$$

donde  $\lambda$  debe ser una constante, ya que es la única posibilidad aceptable si el primer término de la ecuación (2.6) (que solo depende de  $x$ ) debe ser igual al segundo (que solo depende de  $t$ ). Como es habitual, esto lleva a dos ecuaciones diferenciales ordinarias, que son sencillas de resolver:

$$\frac{dT(t)}{dt} = -\lambda T(t), \quad \Rightarrow \quad T(t) \propto \exp(-\lambda t). \quad (2.7)$$

$$\frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \lambda X(x) = 0, \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} X(x) = A \operatorname{sen}(\sqrt{\lambda}x) + B \operatorname{cos}(\sqrt{\lambda}x), & \lambda \neq 0. \\ X(x) = A_0 + B_0 x, & \lambda = 0. \end{cases} \quad (2.8)$$

Ahora se ha de tener en cuenta las condiciones de contorno:

$$u^h(\pm 1, t) = X(\pm 1)T(t), \quad \forall t \quad \Rightarrow \quad X(\pm 1) = 0. \quad (2.9)$$

Llevando (2.9) a (2.8) se deduce que

$$A_0 = B_0 = 0. \quad (2.10)$$

$$A \operatorname{sen}(\sqrt{\lambda}) = B \operatorname{cos}(\sqrt{\lambda}) = 0. \quad (2.11)$$

De (2.10) resulta que no hay solución diferente de cero asociada al valor propio  $\lambda = 0$ . Sin embargo de (2.11) se obtienen resultados interesantes: para que se cumplan estas dos igualdades pueden suceder dos casos:

$$(i) \quad A \neq 0, \quad B = 0, \quad \operatorname{sen}(\sqrt{\lambda}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \sqrt{\lambda_{1,n}} = n\pi, \quad (2.12)$$

$$(ii) \quad A = 0, \quad B \neq 0, \quad \operatorname{cos}(\sqrt{\lambda}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \sqrt{\lambda_{2,n}} = \frac{(2n+1)\pi}{2}, \quad (2.13)$$



donde se han puesto subíndices a los posibles valores del parámetro  $\lambda$  para distinguirlos unos de otros. En ambos casos en principio  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , pero sin pérdida de generalidad es suficiente con tomar solo  $n = 0, 1, 2, \dots$  (de hecho en (2.12) el valor  $n = 0$  es irrelevante, pues da la solución trivial). A continuación se consideran separadamente estos dos casos que se acaban de detectar:

- (i) Lo primero que se ha de hacer es sustituir los valores hallados para  $\lambda$  en este caso, es decir  $\lambda_{1,n}$  en (2.7), para hallar la dependencia temporal. Se tiene

$$T(t) \propto \exp(-\lambda_{1,n}t), \quad (2.14)$$

de modo que teniendo esto en cuenta, y además (2.12), las soluciones para este caso son las siguientes

$$u_{1,n}^h(x, t) = A_n \exp(-\lambda_{1,n}t) \operatorname{sen}(\sqrt{\lambda_{1,n}}x) = A_n e^{-n^2\pi^2 t} \operatorname{sen}(n\pi x). \quad (2.15)$$

Este es el primer tipo de soluciones elementales del problema que se está considerando.

- (ii) Para hallar el segundo tipo de soluciones fundamentales se deben sustituir los valores hallados para  $\lambda = \lambda_{2,n}$  en (2.7), para hallar la dependencia temporal, que es

$$T(t) \propto \exp(-\lambda_{2,n}t), \quad (2.16)$$

de manera que con esto y con (2.13), las soluciones para este segundo caso son

$$u_{2,n}^h(\xi, \tau) = B_n \exp(-\lambda_{2,n}t) \operatorname{cos}(\sqrt{\lambda_{2,n}}x) = B_n e^{-(\frac{2n+1}{2})^2\pi^2 t} \operatorname{cos}(\frac{2n+1}{2}\pi x). \quad (2.17)$$

Recopilando todos los resultados obtenidos hasta ahora, se puede decir que la solución más general de la ecuación homogénea (2.5) con condiciones de Dirichlet homogéneas en  $x = \pm 1$  es

$$u^h(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{-n^2\pi^2 t} \operatorname{sen}(n\pi x) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n e^{-\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2 t} \operatorname{cos}(\frac{2n+1}{2}\pi x). \quad (2.18)$$

Para hallar la solución de la ecuación con fuentes (2.3) que verifica las condiciones de contorno establecidas lo que se hace es permitir que en (2.18) lo que eran constantes sean funciones desconocidas de  $t$ , es decir:

$$u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) e^{-n^2\pi^2 t} \operatorname{sen}(n\pi x) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n(t) e^{-\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2 t} \operatorname{cos}(\frac{2n+1}{2}\pi x). \quad (2.19)$$

Es obvio que esta expresión cumple las condiciones de contorno  $u(\pm 1, t) = 0$ , como era de esperar.

Para determinar las funciones  $A_n(t)$  y  $B_n(t)$ , se sustituye (2.19) en (2.3). Tras operar se llega a lo siguiente:

$$\left[ \sum_{n=0}^{\infty} \dot{A}_n(t) e^{-n^2 \pi^2 t} \operatorname{sen}(n\pi x) + \sum_{n=0}^{\infty} \dot{B}_n(t) e^{-\frac{(2n+1)^2}{4} \pi^2 t} \cos\left(\frac{2n+1}{2} \pi x\right) \right] + k\delta(x)\delta(t-t_0) = 0. \quad (2.20)$$

A partir de (2.20) se van a obtener los valores de los coeficientes  $A_n(t)$  y  $B_n(t)$ . Para ello se deben tener en cuenta los siguientes resultados, que son muy fáciles de comprobar:

$$\int_{-1}^1 \operatorname{sen}(n\pi x) \operatorname{sen}(m\pi x) dx = \delta_{n,m}. \quad (2.21)$$

$$\int_{-1}^1 \operatorname{sen}(n\pi x) \cos\left(\frac{2m+1}{2} \pi x\right) dx = 0. \quad (2.22)$$

$$\int_{-1}^1 \cos\left(\frac{2n+1}{2} \pi x\right) \cos\left(\frac{2m+1}{2} \pi x\right) dx = \delta_{n,m}. \quad (2.23)$$

También se deben utilizar las propiedades de la delta de Dirac, que pueden encontrarse en [11]. Así pues, multiplicando (2.20) por  $\operatorname{sen}(m\pi x)$  e integrando en el intervalo  $[-1, 1]$  se tiene:

$$\dot{A}_n(t) e^{-n^2 \pi^2 t} = \int_{-1}^1 [-k\delta(x)\delta(t-t_0)] \operatorname{sen}(n\pi x) dx = 0, \quad (2.24)$$

de modo que todos los coeficientes  $A_n(t) = k_1$ , deben ser necesariamente constantes, no dependen del tiempo. A continuación se multiplica (2.20) por  $\cos\left(\frac{2m+1}{2} \pi x\right)$  y se integra en el intervalo  $[-1, 1]$ . Teniendo en cuenta que el desarrollo de Fourier de la  $\delta(x)$  es

$$\delta(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \cos\left(\frac{2n+1}{2} \pi x\right) \quad (2.25)$$

se llega a lo siguiente:

$$\dot{B}_n(t) = -k \delta(t-t_0) e^{\frac{(2n+1)^2}{4} \pi^2 t_0}, \quad (2.26)$$

e integrando se obtiene:

$$B_n(t) = -kH(t-t_0) e^{\frac{(2n+1)^2}{4} \pi^2 t_0} + k_2. \quad (2.27)$$

Sustituyendo los coeficientes  $A_n(t)$  y  $B_n(t)$  en (2.19):

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} k_1 e^{-n^2 \pi^2 t} \operatorname{sen}(n\pi x) \\ &+ \sum_{n=0}^{\infty} \left[ k_2 e^{-\frac{(2n+1)^2}{4} \pi^2 t} - kH(t-t_0) e^{\frac{(2n+1)^2}{4} \pi^2 (t_0-t)} \right] \cos\left(\frac{2n+1}{2} \pi x\right). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Para determinar la forma de los coeficientes  $k_1$  y  $k_2$  es necesario utilizar la condición inicial (2.4). De esta forma:

$$u(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} k_1 \operatorname{sen}(n\pi x) + \sum_{n=0}^{\infty} k_2 \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi x\right) = \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right), \quad (2.29)$$

y utilizando las relaciones (2.21), (2.22) y (2.23) para desarrollar el  $\cos(\frac{\pi}{2}x)$  en serie de Fourier, se obtiene:

$$k_1 = 0, \quad k_2 = \delta_{0,n}, \quad (2.30)$$

quedando la solución como

$$u(x, t) = e^{-\frac{\pi^2}{4}t} \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) - kH(t - t_0) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2(t-t_0)} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi x\right). \quad (2.31)$$

Se puede observar como, para  $t < t_0$ , la solución no se diferencia del caso libre, y es solo para  $t > t_0$  cuando el potencial afecta a la solución.

Esta solución puede expresarse a partir de un tipo de funciones elípticas, las llamadas *funciones theta*. En [9] y [10], puede encontrarse la definición de estas cuatro funciones, mediante ciertos desarrollos en serie de Fourier. Se trata de las funciones

$$\theta_1(z, q), \quad \theta_2(z, q), \quad \theta_3(z, q), \quad \theta_4(z, q),$$

que como se observa dependen de dos argumentos  $q, z \in \mathbb{C}$ .

En concreto, en la presente situación interesa la función denominada  $\theta_2(z, q)$ , que tiene la siguiente expresión:

$$\theta_2(z, q) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} q^{(n+1/2)^2} \cos((2n+1)z). \quad (2.32)$$

Usando esta definición, se puede comprobar que la solución (2.31) puede transformarse tomando

$$z = \frac{\pi x}{2}, \quad q = e^{-\pi^2(t-t_0)},$$

de modo que se escribe así:

$$u(x, t) = e^{-\frac{\pi^2}{4}t} \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) - \frac{k}{2}H(t - t_0) \theta_2\left(\frac{\pi x}{2}, e^{-\pi^2(t-t_0)}\right). \quad (2.33)$$

Para poder representar la solución obtenida, se debe dar un valor particular a  $t_0$  y a  $k$ . Entonces pueden observarse dos situaciones de la función solución:

- Para  $t < t_0$ , la solución empieza siendo un coseno en  $t = 0$  que se va atenuando a medida que avanza el tiempo, como puede observarse en la Figura 2.1.

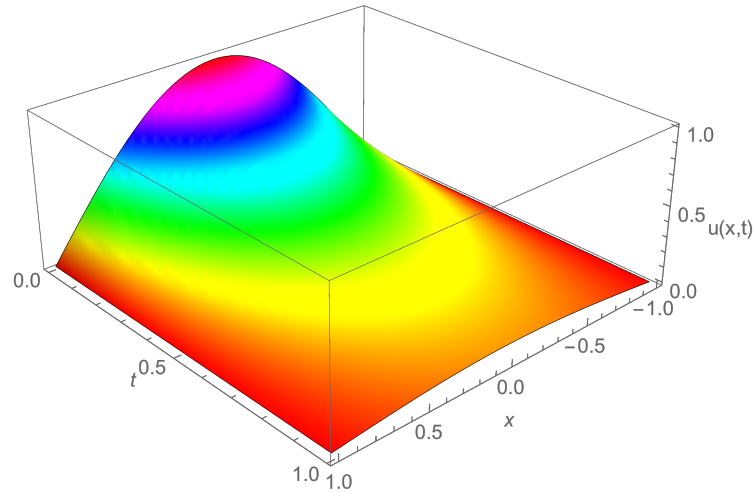


Figura 2.1: Solución de la ecuación del calor (2.33) para  $t_0 = 1$ ,  $k = 2$  y con  $t < t_0$ .

- Para  $t > t_0$ , la solución es negativa y muy pronunciada en un entorno de  $x = 0$  para  $t$  próximos a  $t_0$ , y se va atenuando muy rápidamente a medida que avanza el tiempo, como puede observarse en la Figura 2.2.

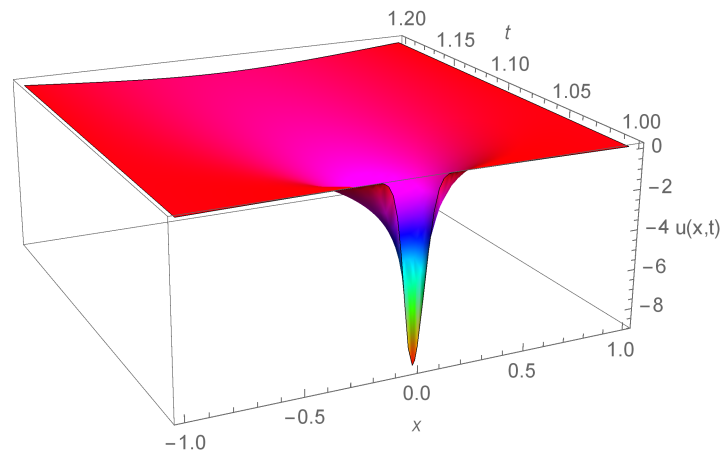


Figura 2.2: Solución de la ecuación del calor (2.33) para  $t_0 = 1$ ,  $k = 2$  y con  $t > t_0$ .

## 2.2. Resolución del potencial cuántico impulsivo por medio de la transformada de Laplace

Al igual que en el apartado anterior, el coeficiente  $g(\tau)$  posee la forma:

$$g(\tau) = k\delta(\tau - \tau_0), \quad k \neq 0, \quad \tau_0 > 0. \quad (2.34)$$

Usando (1.23) y (2.34), la expresión (1.20) queda:

$$\phi_{\xi\xi}(\xi, \tau) + i\phi_\tau(\xi, \tau) = k\phi(0, \tau_0)\delta(\xi)\delta(\tau - \tau_0), \quad \xi \in [-1, 1], \quad \tau \in \mathbb{R}, \quad (2.35)$$

con condiciones de contorno  $\phi(\pm 1, \tau) = 0$ . La principal diferencia entre esta ecuación y (2.3) reside en la expresión  $\phi(0, \tau_0)$  que aparece en la de Schrödinger. Esto va a llevar a alguna modificación en el resultado final respecto a (2.31).

Para resolver esta EDP en el intervalo  $[-1, 1]$ , con condiciones de contorno de Dirichlet  $\phi(\pm 1, \tau) = 0$  y condición inicial  $\phi(\xi, 0) = f(\xi)$ , y dada la *aparente* sencillez del potencial que se está analizando, se va a utilizar el formalismo de la transformada de Laplace. Para ello, se debe realizar la transformada de Laplace de la expresión anterior con respecto a la variable  $\tau$ . Llamando a la transformada de la función  $\phi(\xi, \tau)$ :

$$\mathcal{L}_\tau[\phi(\xi, \tau)] = u(\xi, s) := \int_0^\infty e^{-s\tau} \phi(\xi, \tau) d\tau, \quad (2.36)$$

y utilizando las propiedades de las transformadas de Laplace, se puede llegar a:

$$\mathcal{L}_\tau[\phi_{\xi\xi}(\xi, \tau)] = u_{\xi\xi}(\xi, s), \quad (2.37)$$

$$\mathcal{L}_\tau[\phi_\tau(\xi, \tau)] = s u(\xi, s) - \phi(\xi, 0) = s u(\xi, s) - f(\xi), \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\tau[kf(0)\delta(\tau - \tau_0)\delta(\xi)] &= k\phi(0, \tau_0)\delta(\xi)\mathcal{L}_\tau[\delta(\tau - \tau_0)] \\ &= ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)\delta(\xi). \end{aligned} \quad (2.39)$$

En la última igualdad se ha tenido en cuenta lo siguiente:

$$\mathcal{L}_\tau[\delta(\tau - \tau_0)] = \int_0^\infty e^{-s\tau} \delta(\tau - \tau_0) d\tau = e^{-s\tau_0}, \quad \tau_0 > 0. \quad (2.40)$$

Volviendo a la transformación de la ecuación (2.35), sustituyendo ahí los resultados anteriores y despejando se llega a:

$$u_{\xi\xi}(\xi, s) + is u(\xi, s) = ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)\delta(\xi) + if(\xi), \quad (2.41)$$

que es la ecuación que debe resolverse, teniendo en cuenta las condiciones de contorno transformadas

$$\mathcal{L}_\tau[\phi(\pm 1, \tau)] = 0 \quad \Rightarrow \quad u(\pm 1, s) = 0, \quad (2.42)$$

y la condición de la derivada transformada, obtenida a partir de (1.24) y de la condición (2.34)

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_\tau[\phi_\xi(0^+, \tau) - \phi_\xi(0^-, \tau)] &= \mathcal{L}_\tau[k\phi(0, \tau_0)\delta(\tau - \tau_0)] \Rightarrow \\ u_\xi(0^+, s) - u_\xi(0^-, s) &= ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0),\end{aligned}\quad (2.43)$$

que está indicando que la derivada parcial respecto de  $\xi$  de la función  $u(\xi, s)$  no es continua en  $\xi = 0$ .

Hay que resolver  $u(\xi, \tau)$  para la EDP (2.41), con la condición inicial (1.23) y las condiciones de contorno (2.42). Dado que (2.41) es una EDP de segundo orden lineal no homogénea se resolverá, como es habitual, obteniendo primero la solución de la EDP homogénea asociada, es decir:

$$u_{\xi\xi}^h(\xi, s) + isu^h(\xi, s) = 0, \quad \xi \in [-1, 1],, \quad u^h(\pm 1, \tau) = 0, \quad (2.44)$$

cuya resolución es inmediata, obteniéndose:

$$u^h(\xi, s) = A(s)e^{i\sqrt{is}\xi} + B(s)e^{-i\sqrt{is}\xi}. \quad (2.45)$$

Para hallar la solución de la ecuación no homogénea (2.41) que verifica las condiciones de contorno establecidas lo que se hace es permitir que en (2.45), los coeficientes  $A(s)$  y  $B(s)$  sean funciones desconocidas de  $\xi$ , es decir:

$$u(\xi, s) = A(\xi, s)e^{i\sqrt{is}\xi} + B(\xi, s)e^{-i\sqrt{is}\xi}. \quad (2.46)$$

La derivada primera de esta función es:

$$u_\xi(\xi, s) = A_\xi(\xi, s)e^{i\sqrt{is}\xi} + i\sqrt{is}A(\xi, s)e^{i\sqrt{is}\xi} + B_\xi(\xi, s)e^{-i\sqrt{is}\xi} - i\sqrt{is}B(\xi, s)e^{-i\sqrt{is}\xi}. \quad (2.47)$$

Como es habitual en el método de “variación de las constantes”, se escogen los dos coeficientes  $A(\xi, s)$  y  $B(\xi, s)$  tales que:

$$A_\xi(\xi, s)e^{i\sqrt{is}\xi} + B_\xi(\xi, s)e^{-i\sqrt{is}\xi} = 0, \quad (2.48)$$

de modo que la expresión (2.47) toma la forma:

$$u_\xi(\xi, s) = i\sqrt{is}(A(\xi, s)e^{i\sqrt{is}\xi} - B(\xi, s)e^{-i\sqrt{is}\xi}). \quad (2.49)$$

Volviendo a derivar:

$$u_{\xi\xi} = i\sqrt{is}(A_\xi(\xi, s)e^{i\sqrt{is}\xi} - B_\xi(\xi, s)e^{-i\sqrt{is}\xi}) - is(A(\xi, s)e^{i\sqrt{is}\xi} + B(\xi, s)e^{-i\sqrt{is}\xi}). \quad (2.50)$$

Sustituyendo las expresiones (2.46) y (2.50) en la ecuación no homogénea (2.41) y despejando se consigue:

$$A_\xi(\xi, s)e^{i\sqrt{is}\xi} - B_\xi(\xi, s)e^{-i\sqrt{is}\xi} = \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)\delta(\xi) + if(\xi)}{i\sqrt{is}}, \quad (2.51)$$

que junto con la condición (2.48) forma un sistema lineal de ecuaciones, a partir del cual se pueden hallar las expresiones de  $A_\xi(\xi, s)$  y  $B_\xi(\xi, s)$ , que quedan:

$$A_\xi(\xi, s) = \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)\delta(\xi) + if(\xi)}{2i\sqrt{is}} e^{-i\sqrt{is}\xi}, \quad (2.52)$$

$$B_\xi(\xi, s) = -\frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)\delta(\xi) + if(\xi)}{2i\sqrt{is}} e^{i\sqrt{is}\xi}. \quad (2.53)$$

Integrando en  $\xi$  las ecuaciones (2.52) y (2.53), se obtienen las expresiones generales para  $A(\xi, s)$  y  $B(\xi, s)$ :

$$A(\xi, s) = \frac{k_1(s)}{2i\sqrt{is}} + \frac{C(\xi, s)}{2\sqrt{is}} + \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)}{2i\sqrt{is}} H(\xi), \quad (2.54)$$

$$B(\xi, s) = \frac{k_2(s)}{2i\sqrt{is}} - \frac{D(\xi, s)}{2\sqrt{is}} - \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)}{2i\sqrt{is}} H(\xi), \quad (2.55)$$

donde  $k_1(s)$  y  $k_2(s)$  no dependen de la variable  $\xi$  y tendremos que hallarlas,  $H(\xi)$  es la función de Heaviside y por comodidad se han introducido las funciones

$$C(\xi, s) = \int^\xi f(y)e^{-i\sqrt{is}y} dy, \quad D(\xi, s) = \int^\xi f(y)e^{i\sqrt{is}y} dy, \quad (2.56)$$

donde  $\int^\xi$  representa integrales indefinidas.

Sustituyendo (2.54) y (2.55) en (2.46), se obtiene:

$$\begin{aligned} u(\xi, s) &= \frac{e^{i\sqrt{is}\xi}}{2i\sqrt{is}} [k_1(s) + iC(\xi, s)] + \frac{e^{-i\sqrt{is}\xi}}{2i\sqrt{is}} [k_2(s) - iD(\xi, s)] \\ &\quad + \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)}{\sqrt{is}} H(\xi) \operatorname{sen}(\sqrt{is}\xi), \end{aligned} \quad (2.57)$$

que, como se puede comprobar, verifica la condición del salto en la derivada (2.43):

$$u_\xi(0^+, s) - u_\xi(0^-, s) = \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)\sqrt{is}}{\sqrt{is}} \cos(\sqrt{is}\xi) \Big|_{\xi=0} = ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0). \quad (2.58)$$

Para obtener  $k_1(s)$  y  $k_2(s)$ , se plantea un sistema de ecuaciones mediante el uso de las condiciones de contorno (2.42):

$$\begin{aligned} u(1, s) &= \frac{e^{i\sqrt{is}}(k_1 + iC(1, s)) + e^{-i\sqrt{is}}(k_2 - iD(1, s))}{2i\sqrt{is}} \\ &\quad + \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0)}{\sqrt{is}} \operatorname{sen}(\sqrt{is}) = 0, \end{aligned} \quad (2.59)$$

$$u(-1, s) = \frac{e^{-i\sqrt{is}}(k_1 + iC(-1, s)) + e^{i\sqrt{is}}(k_2 - iD(-1, s))}{2i\sqrt{is}} = 0, \quad (2.60)$$

ya que  $H(1) = 1$  y  $H(-1) = 0$ . Resolviendo el sistema anterior, se obtienen los valores de las dos funciones  $k_1(s)$  y  $k_2(s)$ :

$$k_1(s) = -i \frac{e^{4i\sqrt{is}}C(1, s) - C(-1, s) - e^{2i\sqrt{is}}D(1, s) + e^{2i\sqrt{is}}D(-1, s)}{e^{4i\sqrt{is}} - 1} + \frac{2ke^{-s\tau_0}e^{3i\sqrt{is}}\phi(0, \tau_0)\text{sen}(\sqrt{is})}{e^{4i\sqrt{is}} - 1}, \quad (2.61)$$

$$k_2(s) = i \frac{e^{2i\sqrt{is}}C(1, s) - e^{2i\sqrt{is}}C(-1, s) - D(1, s) + e^{4i\sqrt{is}}D(-1, s)}{e^{4i\sqrt{is}} - 1} + \frac{2ke^{-s\tau_0}e^{i\sqrt{is}}\phi(0, \tau_0)\text{sen}(\sqrt{is})}{e^{4i\sqrt{is}} - 1}. \quad (2.62)$$

Sustituyendo estas expresiones en (2.57), se halla la expresión final de  $u(\xi, s)$ :

$$u(\xi, s) = \frac{e^{-i\sqrt{is}\xi} \left[ e^{2i\sqrt{is}} \int_{-1}^1 f(y)e^{-i\sqrt{is}y} dy - e^{4i\sqrt{is}} \int_{-1}^{\xi} f(y)e^{i\sqrt{is}y} dy - \int_{\xi}^1 f(y)e^{i\sqrt{is}y} dy \right]}{2\sqrt{is}(e^{4i\sqrt{is}} - 1)} + \frac{e^{i\sqrt{is}\xi} \left[ e^{2i\sqrt{is}} \int_{-1}^1 f(y)e^{i\sqrt{is}y} dy - \int_{-1}^{\xi} f(y)e^{-i\sqrt{is}y} dy - e^{4i\sqrt{is}} \int_{\xi}^1 f(y)e^{-i\sqrt{is}y} dy \right]}{2\sqrt{is}(e^{4i\sqrt{is}} - 1)} - \frac{ke^{-s\tau_0}}{2} \frac{\phi(0, \tau_0)\text{sen}(\sqrt{is}(1 + \xi))}{\sqrt{is}\cos(\sqrt{is})} + ke^{-s\tau_0} \phi(0, \tau_0) \frac{\text{sen}(\sqrt{is}\xi)}{\sqrt{is}} H(\xi). \quad (2.63)$$

Esta es la solución de la EDP (2.41) para la transformada de Laplace, con sus condiciones iniciales y de contorno, que obviamente depende de la elección de  $f(\xi)$ . A continuación se van a hallar algunas soluciones más concretas al elegir ciertas funciones  $f(\xi)$ .

### 2.2.1. Resolución con una condición inicial particular

Para obtener la forma de  $u(\xi, s)$  se debe partir de una condición inicial. A continuación se analizarán diversos ejemplos.

### 2.2.2. El estado fundamental del pozo infinito

En este caso, se va a tomar el estado fundamental de la partícula en un pozo unidimensional (1.15), es decir:

$$f(\xi) = \cos\left(\frac{\pi}{2}\xi\right), \quad (2.64)$$

que cumple  $f(\pm 1) = 0$ , y donde  $f(0) = 1$ .



Sustituyendo  $f(\xi)$  en la expresión (2.63), y operando, se llega a:

$$u(\xi, s) = \frac{1}{\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 i + s} \cos\left(\frac{\pi\xi}{2}\right) - \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0) \operatorname{sen}(\sqrt{is}(1 + \xi))}{2 \sqrt{is} \cos(\sqrt{is})} + \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0) \operatorname{sen}(\sqrt{is}\xi)}{\sqrt{is}} H(\xi). \quad (2.65)$$

Fácilmente puede comprobarse que esta expresión verifica las condiciones de contorno  $u(\pm 1, s) = 0$ . Además, si se efectúa la derivada segunda en función de  $\xi$  de (2.65) y se sustituye en (2.41), se verifica la igualdad.

De los tres términos que forman la solución hallada (2.65), el primero es fácilmente invertible:

$$\mathcal{L}_\tau^{-1} \left[ \frac{1}{\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 i + s} \cos\left(\frac{\pi\xi}{2}\right) \right] = e^{-i(\pi/2)^2\tau} \cos\left(\frac{\pi\xi}{2}\right). \quad (2.66)$$

El resto de términos son más complicados de invertir, y no se va a entrar en detalle en este trabajo. Su transformada inversa de Laplace queda:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\tau^{-1} \left[ -\frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0) \operatorname{sen}(\sqrt{is}(1 + \xi))}{2 \sqrt{is} \cos(\sqrt{is})} + \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0) \operatorname{sen}(\sqrt{is}\xi)}{\sqrt{is}} H(\xi) \right] \\ = -ik\phi(0, \tau_0)H(\tau - \tau_0) \theta_2\left(\frac{\pi\xi}{2}, e^{-i\pi^2(\tau-\tau_0)}\right), \end{aligned} \quad (2.67)$$

donde  $\theta_2\left(\frac{\pi\xi}{2}, e^{-i\pi^2(\tau-\tau_0)/2}\right)$  hace referencia a la función elíptica  $\theta_2(z, q)$ . Hay que señalar que este término es común a todas las soluciones sea cuál sea la condición inicial. La solución queda:

$$\phi(\xi, \tau) = e^{-i(\pi/2)^2\tau} \cos\left(\frac{\pi\xi}{2}\right) - ik\phi(0, \tau_0)H(\tau - \tau_0) \theta_2\left(\frac{\pi\xi}{2}, e^{-i\pi^2(\tau-\tau_0)}\right). \quad (2.68)$$

Para hallar la solución final, hay que obtener el valor de la solución en el origen para un tiempo  $\tau = \tau_0$ . Para ello, se va a definir la función de Heaviside en el origen como:

$$H(0) = 0. \quad (2.69)$$

Sustituyendo en (2.68) y operando, la solución final queda:

$$\phi(\xi, \tau) = e^{-i(\pi/2)^2\tau} \cos\left(\frac{\pi\xi}{2}\right) - ik e^{-i(\pi/2)^2\tau_0} H(\tau - \tau_0) \theta_2\left(\frac{\pi\xi}{2}, e^{-i\pi^2(\tau-\tau_0)}\right). \quad (2.70)$$

### 2.2.3. Los estados pares del pozo infinito

También se pueden utilizar como condición inicial los estados excitados de la partícula libre en un pozo unidimensional (1.14). Para empezar, se tomarán los estados de la

forma coseno:

$$f(\xi) = \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2}\xi\right), \quad (2.71)$$

con  $n \in \mathbb{N}$ . Sustituyendo en la expresión (2.63), y operando, se llega a:

$$\begin{aligned} u(\xi, s) = & \frac{\cos\left(\frac{(2n+1)\pi\xi}{2}\right)}{\left(\frac{\pi}{2} + n\pi\right)^2 i + s} - \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0) \operatorname{sen}(\sqrt{is}(1 + \xi))}{2 \sqrt{is} \cos(\sqrt{is})} \\ & + \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0) \operatorname{sen}(\sqrt{is}\xi)}{\sqrt{is}} H(\xi). \end{aligned} \quad (2.72)$$

La función es idéntica a la obtenida en (2.65) salvo el primer factor. Es fácilmente comprobable que, tomando para  $n$  el valor 0, se obtiene (2.65).

También aquí el primer término en (2.72) es fácilmente invertible:

$$\mathcal{L}_\tau^{-1} \left[ \frac{\cos\left(\frac{(2n+1)\pi\xi}{2}\right)}{\left(\frac{\pi}{2} + n\pi\right)^2 i + s} \right] = e^{-i\left(\frac{\pi}{2} + n\pi\right)^2 \tau} \cos\left(\frac{(2n+1)\pi\xi}{2}\right), \quad (2.73)$$

y usando (2.67) se tiene:

$$\begin{aligned} \phi(\xi, \tau) = & e^{-i\left(\frac{\pi}{2} + n\pi\right)^2 \tau} \cos\left(\frac{(2n+1)\pi\xi}{2}\right) \\ & - ik\phi(0, \tau_0) H(\tau - \tau_0) \theta_2\left(\frac{\pi\xi}{2}, e^{-i\pi^2(\tau - \tau_0)}\right). \end{aligned} \quad (2.74)$$

Usando (2.69), se obtiene la solución final:

$$\begin{aligned} \phi(\xi, \tau) = & e^{-i\left(\frac{\pi}{2} + n\pi\right)^2 \tau} \cos\left(\frac{(2n+1)\pi\xi}{2}\right) \\ & - ik e^{-i\left(\frac{\pi}{2} + n\pi\right)^2 \tau_0} H(\tau - \tau_0) \theta_2\left(\frac{\pi\xi}{2}, e^{-i\pi^2(\tau - \tau_0)}\right). \end{aligned} \quad (2.75)$$

## 2.2.4. Los estados impares del pozo infinito

Si se toman ahora los estados de la forma seno (1.13)

$$f(\xi) = \operatorname{sen}(n\pi\xi), \quad n \in \mathbb{N}, \quad (2.76)$$

y se sustituye en la expresión (2.63) y se opera, se llega a:

$$\begin{aligned} u(\xi, s) = & \frac{1}{in^2\pi^2 + s} \operatorname{sen}(n\pi\xi) - \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0) \operatorname{sen}(\sqrt{is}(1 + \xi))}{2 \sqrt{is} \cos(\sqrt{is})} \\ & + \frac{ke^{-s\tau_0}\phi(0, \tau_0) \operatorname{sen}(\sqrt{is}\xi)}{\sqrt{is}} H(\xi). \end{aligned} \quad (2.77)$$

En este caso la transformación inversa del primer término da como resultado lo siguiente:

$$\mathcal{L}_\tau^{-1} \left[ \frac{1}{in^2\pi^2 + s} \text{sen}(n\pi\xi) \right] = e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi), \quad (2.78)$$

y utilizando (2.67):

$$\phi(\xi, \tau) = e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi) - ik\phi(0, \tau_0)H(\tau - \tau_0) \theta_2 \left( \frac{\pi\xi}{2}, e^{-i\pi^2(\tau - \tau_0)} \right). \quad (2.79)$$

Usando (2.69), se obtiene la solución final:

$$\phi(\xi, \tau) = e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi). \quad (2.80)$$

Si se calcula la derivada de esta función y se sustituye en (2.43), es obvio que:

$$\phi_\xi(0^+, t) - \phi_\xi(0^-, t) = 0, \quad (2.81)$$

es decir, la derivada de  $u(\xi, s)$  pasa a ser continua. Esto es debido a que, en este caso, la condicional inicial en  $\xi = 0$  es nula, que es donde aparece la discontinuidad debido a la presencia de la delta en ese punto. Debido a ello, la función no se ve afectada por la delta en  $\xi = 0$ , y seguirá anulándose para cualquier tiempo, lo que indica que, partiendo de este tipo de condiciones iniciales, la evolución temporal es la misma que si no existiera ningún tipo de perturbación de tipo  $\delta$ .

## 2.3. Resolución del potencial cuántico impulsivo por medio de series de Fourier

La ecuación a resolver es (2.35). Para resolverla por el método de Fourier, se opera de la misma forma que en (2.3), obteniendo primero la solución homogénea y aplicando posteriormente variación de las constantes. De esta manera, se consiguen las expresiones

$$\phi(\xi, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(\tau) e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n(\tau) e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right) \quad (2.82)$$

para la solución general y

$$i \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \dot{A}_n(\tau) e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi) + \sum_{n=0}^{\infty} \dot{B}_n(\tau) e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right) \right] = k\phi(0, \tau_0)\delta(\xi)\delta(\tau - \tau_0). \quad (2.83)$$

para obtener los coeficientes  $A_n(\tau)$  y  $B_n(\tau)$ . Utilizando el mismo procedimiento que se usó en (2.20), las expresiones quedan:

$$A_n(\tau) = k_1, \quad (2.84)$$

$$B_n(\tau) = -ik\phi(0, \tau_0)H(\tau - \tau_0)e^{i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau_0} + k_2. \quad (2.85)$$

Sustituyendo (2.84) y (2.85) en (2.82):

$$\begin{aligned}\phi(\xi, \tau) &= \sum_{n=0}^{\infty} k_1 e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi) \\ &+ \sum_{n=0}^{\infty} k_2 e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right) \\ &- i \sum_{n=0}^{\infty} k \phi(0, \tau_0) H(\tau - \tau_0) e^{i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2(\tau_0-\tau)} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right).\end{aligned}\quad (2.86)$$

Para hallar los coeficientes  $k_1$  y  $k_2$ , se necesita una condición inicial. Se utilizará la misma que en la ecuación del calor, es decir, (2.4). Con esto se tiene:

$$\phi(\xi, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} k_1 \text{sen}(n\pi\xi) + \sum_{n=0}^{\infty} k_2 \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right) = \cos\left(\frac{\pi}{2}\xi\right), \quad (2.87)$$

y desarrollando  $\cos\left(\frac{\pi}{2}\xi\right)$  en serie de Fourier, se tiene:

$$k_1 = 0, \quad (2.88)$$

$$k_2 = \delta_{0,n}. \quad (2.89)$$

Sustituyendo en (2.86) se consigue la expresión de la solución:

$$\begin{aligned}\phi(\xi, \tau) &= e^{-i\frac{\pi^2}{4}\tau} \cos\left(\frac{\pi}{2}\xi\right) \\ &- ik \phi(0, \tau_0) H(\tau - \tau_0) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2(\tau-\tau_0)} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right).\end{aligned}\quad (2.90)$$

Puede observarse que la solución depende del valor de  $\phi(0, \tau_0)$ , el cual no es conocido, pues depende de  $\phi(\xi, \tau)$ , que es lo que se pretende hallar. Para averiguarlo, se calcula el valor de la solución en el origen a tiempo  $\tau_0$ , como se hizo en 2.2.1 usando (2.69):

$$\begin{aligned}\phi(\xi, \tau) &= e^{-i\frac{\pi^2}{4}\tau} \cos\left(\frac{\pi}{2}\xi\right) \\ &- ik e^{-i\frac{\pi^2}{4}\tau_0} H(\tau - \tau_0) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2(\tau-\tau_0)} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right),\end{aligned}\quad (2.91)$$

y teniendo en cuenta (2.32), la solución final queda:

$$\phi(\xi, \tau) = e^{-i(\pi/2)^2\tau} \cos\left(\frac{\pi\xi}{2}\right) - ik e^{-i(\pi/2)^2\tau_0} H(\tau - \tau_0) \theta_2\left(\frac{\pi\xi}{2}, e^{-i\pi^2(\tau-\tau_0)}\right), \quad (2.92)$$

con  $z = \frac{\pi\xi}{2}$  y  $q = e^{-i\pi^2(\tau-\tau_0)}$ .

## 2.4. Un modelo cuántico impulsivo simplificado

Si se analiza la solución (2.92) se comprueba que la solución que no es normalizable, lo cual no debería ocurrir en circunstancias normales. Para poder estudiarla mejor se puede optar por simplificar la ecuación (1.20), de modo que:

$$\frac{\partial^2 \phi(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} + i \frac{\partial \phi(\xi, \tau)}{\partial \tau} = g(\tau) \phi(\xi, \tau), \quad \xi \in [-1, 1], \quad \tau \in \mathbb{R}, \quad (2.93)$$

y tomando la condición (2.2) queda:

$$\frac{\partial^2 \phi(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} + i \frac{\partial \phi(\xi, \tau)}{\partial \tau} = k \delta(\tau - \tau_0) \phi(\xi, \tau), \quad \xi \in [-1, 1], \quad \tau \in \mathbb{R}, \quad (2.94)$$

que puede resolverse por separación de variables. Para ello, se define

$$\phi(\xi, \tau) = X(\xi)T(\tau) \quad (2.95)$$

y (2.94) se transforma en

$$-\frac{1}{X(\xi)} \frac{d^2 X(\xi)}{d\xi^2} = i \frac{1}{T(\tau)} \frac{dT(\tau)}{d\tau} - k \delta(\tau - \tau_0) = c. \quad (2.96)$$

La parte dependiente de  $\xi$  es idéntica a (2.6), luego existen dos soluciones posibles:

$$X(\xi) = \begin{cases} k_{2n} \text{sen}(n\pi\xi). \\ k_{2n+1} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right). \end{cases} \quad (2.97)$$

con  $c_n = n\pi$  o  $c_n = \frac{2n+1}{2}\pi$ , respectivamente.

La ecuación para la parte temporal es:

$$i \dot{T}(\tau) - [k\delta(\tau - \tau_0) + c_n]T(\tau). \quad (2.98)$$

Puesto que la  $\delta(\tau - \tau_0)$  solo afecta para  $\tau = \tau_0$  puede ignorarse al resolver la EDP. La solución queda:

$$T(\tau) = T_0 e^{-ic_n \tau}. \quad (2.99)$$

Sin embargo, la presencia de la  $\delta(\tau - \tau_0)$  impone que la función no sea continua en  $\tau_0$ , pues debe tener un salto en la derivada. Por lo tanto, la solución para la parte temporal debe quedar:

$$T(\tau) = T_1 e^{-ic_n \tau} H(\tau_0 - \tau) + T_2 e^{-ic_n \tau} H(\tau - \tau_0). \quad (2.100)$$

Y su derivada es:

$$\dot{T}(\tau) = -ic_n T(\tau) + e^{-ic_n \tau} (T_2 - T_1) \delta(\tau - \tau_0). \quad (2.101)$$

Despejando  $\dot{T}(\tau)$  en (2.98) y sustituyendo:

$$-ic_n T(\tau) + e^{-ic_n \tau_0} (T_2 - T_1) \delta(\tau - \tau_0) = -ic_n T(\tau) - ik \delta(\tau - \tau_0) T(\tau_0). \quad (2.102)$$

Operando aquí se obtiene la condición:

$$(T_2 - T_1) \left(1 + \frac{ik}{2}\right) = 0. \quad (2.103)$$

Como  $T_1 \neq T_2$ , debe ocurrir que

$$\left(1 + \frac{ik}{2}\right) = 0, \quad (2.104)$$

y la expresión para  $k$  es:

$$k = 2i. \quad (2.105)$$

Esto indica que, para obtener una solución válida de esta ecuación usando un potencial impulsivo, este debe tomar la forma concreta

$$V(\tau) = 2i\delta(\tau - \tau_0). \quad (2.106)$$

Volviendo a (2.98) y sustituyendo (2.101) y (2.105) en ella, operando queda:

$$c_n T + ie^{-ic_n \tau_0} (T_2 - T_1) \delta(\tau - \tau_0) = c_n T + 2i\delta(\tau - \tau_0) T(\tau). \quad (2.107)$$

Como  $T(\tau)$  no es continua en  $\tau = \tau_0$ , el valor  $T(\tau_0)$  corresponde a la semidiferencia de los límites laterales. La ecuación tras operar queda:

$$e^{-ic_n \tau_0} (T_2 - T_1) = 2e^{-ic_n \tau_0} \frac{T_2 - T_1}{2}, \quad (2.108)$$

que indica que no existe ninguna condición entre  $T_1$  y  $T_2$ . Las soluciones finales quedan:

$$\phi_{2n}(\xi, \tau) = \text{sen}(n\pi\xi) e^{-in\pi\tau} [T_{1n} H(\tau_0 - \tau) + T_{2n} H(\tau - \tau_0)], \quad (2.109)$$

$$\phi_{2n+1}(\xi, \tau) = \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right) e^{-i\frac{2n+1}{2}\pi\tau} [G_{1n} H(\tau_0 - \tau) + G_{2n} H(\tau - \tau_0)]. \quad (2.110)$$

Se puede normalizar la ecuación. Para  $\tau < \tau_0$ , se debe cumplir que:

$$\int_{-1}^1 |\phi_{2n}(\xi, \tau)|^2 d\xi = \int_{-1}^1 |\phi_{2n+1}(\xi, \tau)|^2 d\xi = 1, \quad (2.111)$$

obteniéndose

$$T_{1n} = G_{1n} = 1. \quad (2.112)$$

Y para  $\tau > \tau_0$ , teniendo en cuenta que  $T_{1n} \neq T_{2n}$  y  $G_{1n} \neq G_{2n}$ :

$$T_{2n} = G_{2n} = e^{i\theta}. \quad (2.113)$$

Teniendo en cuenta (2.106), (2.112) y (2.113) se puede llegar a dos conclusiones:

- (i) En principio la ecuación no posee solución única. Cualquier solución que cumpla (2.113) es válida.
- (ii) El potencial (2.106) es imaginario, luego el hamiltoniano no es hermítico y, por tanto, no tiene por qué conservarse la norma. Estos potenciales imaginarios están asociados con estados resonantes, los cuales pueden estudiarse mediante análisis funcional, que requiere una serie de conocimientos demasiado avanzados para lo que se pretende en este estudio.





# Capítulo 3

## Coeficiente general dependiente del tiempo

### 3.1. Planteamiento del problema

El objetivo en este capítulo es resolver la ecuación (1.20) con  $g(\tau)$  un coeficiente general sin determinar. Basándonos en lo que sabemos de la teoría de ecuaciones en derivadas parciales y de la teoría de distribuciones, podemos darnos cuenta de que la ecuación que hay que resolver (1.20) puede verse como una ecuación en derivadas parciales de segundo orden con fuentes externas, ya que el término de la derecha correspondería a las fuentes, aunque bien es verdad que depende de alguna manera de la solución que se busca.

Otro detalle que conviene observar es que la ecuación (1.20) es semejante a la ecuación del calor si se considera un cambio de variable en el que el tiempo  $\tau$  se supone que toma valores imaginarios  $\tau = i\tau'$  (este cambio es muy usual en Teoría Cuántica de Campos y se denomina rotación de Wick).

Todos estos comentarios son con el fin de justificar que para buscar la solución procederemos en la manera usual al resolver un problema de propagación del calor con fuentes: primero se resuelve la ecuación sin fuentes con sus condiciones de contorno homogéneas y luego se aplica el método de variación de las constantes para hallar la contribución de las fuentes.

Con el fin de poder trabajar con una función incógnita que sea continua en el origen, como suele ser habitual se postula una solución de la forma:

$$\phi(\xi, \tau) = S(\xi, \tau) + v(\xi, \tau). \quad (3.1)$$

El objetivo es que  $S(\xi, \tau)$  se lleve la condición de discontinuidad de la derivada en el

origen, y  $v(\xi, \tau)$  sea una función continua, con derivada primera continua respecto de  $\xi$  y que cumpla condiciones de contorno homogéneas  $v(\pm 1, \tau) = 0$ .

Se toma como función prueba una definida a trozos y que cumpla lo que interesa de manera lo más sencilla posible en  $\xi$ :

$$S(\xi, \tau) = \begin{cases} a(\xi, \tau)(1 + \xi), & \xi \in [-1, 0], \\ b(\xi, \tau)(1 - \xi), & \xi \in [0, 1], \end{cases} \quad (3.2)$$

donde  $a(\xi, \tau)$  y  $b(\xi, \tau)$  se suponen suficientemente regulares en sus dominios de definición. La función (3.2) cumple las condiciones de contorno:

$$S(\pm 1, \tau) = 0. \quad (3.3)$$

Como se quiere que además sea continua en el origen:

$$S(0, \tau) = a(0, \tau) = b(0, \tau) := \alpha(\tau), \quad (3.4)$$

donde  $\alpha(\tau)$  es una función por determinar. La derivada de (3.2) respecto a  $\xi$  es:

$$S_\xi(\xi, \tau) = \begin{cases} a_\xi(\xi, \tau)(1 + \xi) + a(\xi, \tau), & \xi \in (-1, 0), \\ b_\xi(\xi, \tau)(1 - \xi) - b(\xi, \tau), & \xi \in (0, 1). \end{cases} \quad (3.5)$$

Las derivadas en el origen no son iguales y dependen de cómo nos acerquemos a ese punto:

$$S_\xi(0^+, \tau) = b_\xi(0, \tau) - \alpha(\tau), \quad (3.6)$$

$$S_\xi(0^-, \tau) = a_\xi(0, \tau) + \alpha(\tau). \quad (3.7)$$

Usando estas dos expresiones, junto con (3.1) y (3.4), la condición sobre el salto de la derivada en el origen (1.24) es:

$$b_\xi(0, \tau) - a_\xi(0, \tau) - 2\alpha(\tau) = g(\tau)[\alpha(\tau) + v(0, \tau)], \quad (3.8)$$

donde estamos suponiendo que  $v(\xi, \tau)$  y  $v_\xi(\xi, \tau)$  son funciones continuas en todo el intervalo  $[-1, 1]$ , y en concreto en  $\xi = 0$ , llamando:

$$\varphi(\tau) = v(0, \tau). \quad (3.9)$$

Despejando en (3.8):

$$\alpha(\tau) = \frac{b_\xi(0, \tau) - a_\xi(0, \tau) - g(\tau)\varphi(\tau)}{2 + g(\tau)}. \quad (3.10)$$

Para precisar la forma funcional de  $a(\xi, \tau)$  y  $b(\xi, \tau)$ , se proponen desarrollos de Taylor, quedándose solo con los términos de primer orden en  $\xi$ :

$$\begin{cases} a(\xi, \tau) = \alpha(\tau) + \beta(\tau)\xi. \\ b(\xi, \tau) = \alpha(\tau) + \gamma(\tau)\xi. \end{cases} \quad (3.11)$$

Donde, por comodidad, se ha introducido la notación

$$a_\xi(0, \tau) = \beta(\tau), \quad b_\xi(0, \tau) = \gamma(\tau), \quad (3.12)$$

de manera que la ecuación (3.10) queda escrita como

$$\alpha(\tau) = \frac{\gamma(\tau) - \beta(\tau) - g(\tau)\varphi(\tau)}{2 + g(\tau)}. \quad (3.13)$$

En esta expresión  $g(\tau)$  es uno de los datos iniciales y por ello es conocida, por lo que está dando lo que vale  $\alpha(\tau)$  en términos de las otras funciones, por ahora desconocidas y que se desean hallar:  $\beta(\tau)$  y  $\gamma(\tau)$ .

La función de prueba (3.2) queda como:

$$S(\xi, \tau) = \begin{cases} [\alpha(\tau) + \beta(\tau)\xi] (1 + \xi), & \xi \in [-1, 0], \\ [\alpha(\tau) + \gamma(\tau)\xi] (1 - \xi), & \xi \in [0, 1]. \end{cases} \quad (3.14)$$

Las derivadas respecto a  $\xi$  quedan entonces como:

$$S_\xi(\xi, \tau) = \begin{cases} \alpha(\tau) + \beta(\tau) + 2\beta(\tau)\xi, & \xi \in (-1, 0), \\ \gamma(\tau) - \alpha(\tau) - 2\gamma(\tau)\xi, & \xi \in (0, 1). \end{cases} \quad (3.15)$$

Y mediante (3.13):

$$S_{\xi\xi}(\xi, \tau) = g(\tau)[\alpha(\tau) + \varphi(\tau)] \delta(\xi) + \begin{cases} 2\beta(\tau), & \xi \in (-1, 0), \\ -2\gamma(\tau), & \xi \in (0, 1). \end{cases} \quad (3.16)$$

Es importante resaltar que las derivadas de  $S(\xi, \tau)$  no son continuas en  $\xi = 0$ , y de hecho ella y sus primeras derivadas pueden escribirse así

$$S(\xi, \tau) = [(\alpha(\tau) + \beta(\tau)\xi) (1 + \xi)] H(-\xi) + [(\alpha(\tau) + \gamma(\tau)\xi) (1 - \xi)] H(\xi). \quad (3.17)$$

$$S_\xi(\xi, \tau) = [\alpha(\tau) + \beta(\tau) + 2\beta(\tau)\xi] H(-\xi) + [\gamma(\tau) - \alpha(\tau) - 2\gamma(\tau)\xi] H(\xi). \quad (3.18)$$

$$S_{\xi\xi}(\xi, \tau) = 2\beta(\tau) H(-\xi) - 2\gamma(\tau) H(\xi) + g(\tau)[\alpha(\tau) + \varphi(\tau)] \delta(\xi). \quad (3.19)$$

Para finalizar esta parte resta hallar la ecuación en derivadas parciales que debe satisfacer la nueva función incógnita  $v(\xi, \tau)$  que se ha introducido en (3.1) y que se supone suficientemente regular: continua y con derivada parcial primera continua en todo el intervalo  $(-1, 1)$ . Para determinarla, se sustituyen (3.1) y (3.17)–(3.19) en (1.20), y tras operar se llega a

$$v_{\xi\xi}(\xi, \tau) + iv_\tau(\xi, \tau) = g(\tau) [\alpha(\tau) + \varphi(\tau)] \delta(\xi) - S_{\xi\xi}(\xi, \tau) - iS_\tau(\xi, \tau), \quad (3.20)$$

donde  $S_{\xi\xi}(\xi, \tau)$  está dada en (3.19). Para obtener la forma final de la ecuación diferencial (3.20) se debe calcular también la siguiente derivada parcial de  $S(\xi, \tau)$  en (3.14):

$$S_{\tau}(\xi, \tau) = \begin{cases} (\dot{\alpha}(\tau) + \dot{\beta}(\tau)\xi)(1 + \xi), & \xi \in [-1, 0], \\ (\dot{\alpha}(\tau) + \dot{\gamma}(\tau)\xi)(1 - \xi), & \xi \in [0, 1], \end{cases} \quad (3.21)$$

que obviamente es continua en  $\xi = 0$ . Sustituyendo en (3.20), queda:

$$\begin{aligned} v_{\xi\xi}(\xi, \tau) + iv_{\tau}(\xi, \tau) &= -2\beta(\tau)H(-\xi) + 2\gamma(\tau)H(\xi) - i\dot{\alpha}(\tau) \\ &\quad - i\xi \left[ (\dot{\alpha}(\tau) + \dot{\beta}(\tau))H(-\xi) + (\dot{\gamma}(\tau) - \dot{\alpha}(\tau))H(\xi) \right] \\ &\quad - i\xi^2 \left[ \dot{\beta}(\tau)H(-\xi) - \dot{\gamma}(\tau)H(\xi) \right], \end{aligned} \quad (3.22)$$

que sustituye a la ecuación simplificada (1.20). Además, la función  $v(\xi, \tau)$  debe verificar las condiciones de contorno que provienen de las expresiones (1.22) y (3.3):

$$v(\pm 1, \tau) = \phi(\pm 1, \tau) - S(\pm 1, \tau) = 0. \quad (3.23)$$

También habrá que considerar la condición inicial, que se obtiene de las expresiones (1.23) y (3.14):

$$v(\xi, 0) = \phi(\xi, 0) - S(\xi, 0) = f(\xi) - \begin{cases} [\alpha(0) + \beta(0)\xi](1 + \xi), & \xi \in [-1, 0], \\ [\alpha(0) + \gamma(0)\xi](1 - \xi), & \xi \in [0, 1]. \end{cases} \quad (3.24)$$

## 3.2. Resolviendo la ecuación

Como la ecuación (3.22) todavía queda en función de tres variables ( $\alpha(\tau)$ ,  $\beta(\tau)$  y  $\gamma(\tau)$ ), es necesario imponer alguna otra condición para poder resolverla. No es extraño pensar en hacer que las derivadas respecto a  $\xi$  de (3.14) se anulen en los extremos del pozo. Aplicando las condiciones de contorno a (3.15), se obtiene que la nueva condición a usar es:

$$\alpha(\tau) = \beta(\tau) = -\gamma(\tau). \quad (3.25)$$

Sustituyendo en (3.22):

$$\begin{aligned} v_{\xi\xi}(\xi, \tau) + iv_{\tau}(\xi, \tau) &= -2\alpha(\tau)[H(\xi) + H(-\xi)] - i\dot{\alpha}(\tau) \\ &\quad + 2i\xi\dot{\alpha}(\tau)[H(\xi) - H(-\xi)] \\ &\quad - i\xi^2\dot{\alpha}(\tau)[H(\xi) + H(-\xi)]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Usando las propiedades de la función de Heaviside, la expresión anterior queda como:

$$v_{\xi\xi}(\xi, \tau) + iv_{\tau}(\xi, \tau) = -2\alpha(\tau) + i\dot{\alpha}(\tau)[2\xi \operatorname{sgn}(\xi) - 1 - \xi^2], \quad (3.27)$$

donde  $\text{sgn}(\xi)$  es la función signo, definida como:

$$\text{sgn}(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi > 0, \\ 0, & \xi = 0, \\ -1, & \xi < 0. \end{cases} \quad (3.28)$$

A su vez, sustituyendo en la expresión (3.13), esta queda:

$$\alpha(\tau) = -\frac{g(\tau)\varphi(\tau)}{4 + g(\tau)}. \quad (3.29)$$

Hay que resolver  $v(\xi, \tau)$  para la ecuación diferencial en derivadas parciales (EDP) (3.27), con la condición inicial (3.24) y las condiciones de contorno de Dirichlet homogéneas (3.23). Dado que (3.27) es una EDP de 2º orden lineal no homogénea se resolverá, como es habitual, obteniendo primero la solución de la EDP homogénea asociada, es decir:

$$v_{\xi\xi}^h(\xi, \tau) + iv_{\tau}^h(\xi, \tau) = 0, \quad \xi \in [-1, 1], \quad \tau \in \mathbb{R}, \quad v^h(\pm 1, \tau) = 0. \quad (3.30)$$

Esta ecuación es idéntica a la ecuación homogénea correspondiente a (2.35), y por lo tanto la solución homogénea y la solución tras aplicar el método de variación de las constantes será la misma que en este caso:

$$v(\xi, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(\tau) e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n(\tau) e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right). \quad (3.31)$$

Es obvio que esta expresión cumple las condiciones de contorno (3.23), como era de esperar.

Para determinar las funciones  $A_n(\tau)$  y  $B_n(\tau)$ , sustituimos (3.31) en (3.27). Tras operar se llega a lo siguiente:

$$i \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \dot{A}_n(\tau) e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi) + \sum_{n=0}^{\infty} \dot{B}_n(\tau) e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right) \right] \\ = -2\alpha(\tau) + i\dot{\alpha}(\tau)[2\xi \text{sgn}(\xi) - 1 - \xi^2], \quad (3.32)$$

donde se puede observar que la expresión a la derecha de la igualdad es una función par en  $\xi$ .

Se van a necesitar las expresiones (2.21), (2.22) y (2.23). Multiplicando (3.32) por  $\text{sen}(m\pi\xi)$  e integrando en el intervalo  $[-1, 1]$  se tiene:

$$i\dot{A}_n(\tau) e^{-in^2\pi^2\tau} = \int_{-1}^1 [-2\alpha(\tau) + i\dot{\alpha}(\tau)[2\xi \text{sgn}(\xi) - 1 - \xi^2]] \text{sen}(n\pi\xi) d\xi = 0, \quad (3.33)$$

de modo que todos los coeficientes  $A_n(\tau) = A_n$  deben ser necesariamente constantes, no dependen del tiempo. A continuación se multiplica (3.32) por  $\cos(\frac{2m+1}{2}\pi\xi)$  y se integra en el intervalo  $[-1, 1]$ , llegando a lo siguiente:

$$i\dot{B}_n(\tau)e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} = -\frac{8\alpha(\tau)(-1)^n}{\pi + 2n\pi} - \frac{16i\dot{\alpha}(\tau)[\pi + 2n\pi - 2(-1)^n]}{(\pi + 2n\pi)^3}, \quad (3.34)$$

obteniendo una ecuación diferencial para cada  $n$ , y que depende de  $\alpha(\tau)$  y  $\dot{\alpha}(\tau)$ .

El valor en el origen de (3.31) es:

$$v(0, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(\tau)e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau}. \quad (3.35)$$

Teniendo en cuenta la expresión (3.9) y sustituyendo (3.35) en (3.13), se obtiene:

$$\alpha(\tau) = -\frac{g(\tau)}{4 + g(\tau)} \sum_{n=0}^{\infty} B_n(\tau)e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau}. \quad (3.36)$$

Sustituyendo (3.36) en (3.34), se llega a la EDP

$$\begin{aligned} i\dot{B}_n(\tau)e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} &= \frac{8(-1)^n}{\pi + 2n\pi} \frac{g(\tau)}{4 + g(\tau)} \sum_{k=0}^{\infty} B_k(\tau)e^{-i\frac{(2k+1)^2}{4}\pi^2\tau} \\ &+ \frac{16i(\pi + 2n\pi - 2(-1)^n)}{(\pi + 2n\pi)^3} \left( \frac{g(\tau)}{4 + g(\tau)} \right)' \sum_{k=0}^{\infty} B_k(\tau)e^{-i\frac{(2k+1)^2}{4}\pi^2\tau} \\ &+ \frac{16i(\pi + 2n\pi - 2(-1)^n)}{(\pi + 2n\pi)^3} \frac{g(\tau)}{4 + g(\tau)} \sum_{k=0}^{\infty} \dot{B}_k(\tau)e^{-i\frac{(2k+1)^2}{4}\pi^2\tau} \\ &+ \frac{16(\pi + 2n\pi - 2(-1)^n)}{(\pi + 2n\pi)^3} \frac{g(\tau)}{4 + g(\tau)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k+1)^2}{4} \pi^2 B_k(\tau)e^{-i\frac{(2k+1)^2}{4}\pi^2\tau}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Por la dificultad de resolución de estas expresiones, se dejarán así expresadas y se dejarán para estudios posteriores.

### 3.3. Alguna solución particular

Se va a considerar el caso en el que  $g(\tau) = 0$ , que corresponde al caso de partícula libre. Es decir, la ecuación a resolver quedaría, sustituyendo la expresión para  $g(\tau)$  en (1.20):

$$\frac{\partial^2 \phi(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} + i \frac{\partial \phi(\xi, \tau)}{\partial \tau} = 0, \quad \xi \in [-1, 1], \quad \tau \in \mathbb{R}. \quad (3.38)$$

A su vez, la expresión (3.36) queda:

$$\alpha(\tau) = 0, \quad (3.39)$$

y entonces la derivada del factor  $\alpha$  es nula:

$$\dot{\alpha} = 0. \quad (3.40)$$

Esta condición permite simplificar la ecuación diferencial (3.34), que se convierte en:

$$\dot{B}_n(\tau)e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} = 0. \quad (3.41)$$

Llevando el término con la exponencial a la derecha e integrando, se consigue la expresión para los coeficientes  $B_n(\tau)$ :

$$B_n(\tau) = B_n. \quad (3.42)$$

Así, se obtienen los coeficientes de (3.31), que queda:

$$v(\xi, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right). \quad (3.43)$$

A su vez, mediante (3.39), la forma de  $S(\xi, \tau)$ , que aparece en (3.14) queda:

$$S(\xi, \tau) = 0. \quad (3.44)$$

De esta forma, la solución al problema queda:

$$\begin{aligned} \phi(\xi, \tau) &= S(\xi, \tau) + v(\xi, \tau) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{-in^2\pi^2\tau} \text{sen}(n\pi\xi) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi\xi\right). \end{aligned} \quad (3.45)$$

La forma específica de los coeficientes  $A_n$  y  $B_n$  dependerá de la condición inicial particular que se tome. Efectivamente, esta es la expresión de la evolución de la partícula libre.

Si se escoge, por ejemplo, el estado fundamental del pozo (1.15), la solución queda:

$$\phi(\xi, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2\tau} \cos\left(\frac{\pi}{2}\xi\right). \quad (3.46)$$





# Capítulo 4

## Conclusiones

En este trabajo se han analizado las soluciones de la ecuación de Schrödinger obtenidas al plantear un potencial dependiente del tiempo, con una delta de Dirac en el origen para un potencial de base que es el típico pozo infinito de potencial.

Para familiarizarnos con el problema, y dado las semejanzas existentes con la ecuación de Schrödinger, en primer lugar se ha resuelto la ecuación clásica de calor asociada al mismo problema, pero para una dependencia temporal concreta: un impulso en el tiempo representado por una delta de Dirac  $\delta(t - t_0)$ . El resultado que se encuentra es

$$u(x, t) = e^{-\frac{\pi^2}{4}t} \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) - \frac{k}{2}H(t - t_0) \theta_2\left(\frac{\pi x}{2}, e^{-\pi^2(t-t_0)}\right),$$

en términos de una función de Heaviside y de una función elíptica  $\theta_2$ . Como era de esperar, dado que se trata de una ecuación del calor, la solución para  $t < t_0$  es una función evanescente. Para  $t > t_0$  se obtiene una solución con una singularidad alrededor de  $x = 0$ , que también se atenúa muy rápidamente.

A continuación se ha resuelto la ecuación de Schrödinger para el potencial impulsivo antes descrito. La forma de la solución es

$$\phi(\xi, \tau) = e^{-i(\pi/2)^2\tau} \cos\left(\frac{\pi\xi}{2}\right) - ik e^{-i(\pi/2)^2\tau_0} H(\tau - \tau_0) \theta_2\left(\frac{\pi\xi}{2}, e^{-i\pi^2(\tau-\tau_0)}\right),$$

siendo básicamente  $\xi \propto x$ ,  $\tau \propto t$ , y el estado inicial  $\cos(\pi\xi/2)$ . El resultado sugiere que el estado final es un estado caótico y no normalizable, donde contribuyen todos los modos del pozo libre por igual. Esto da cuenta de la dificultad de trabajar con distribuciones, que en ocasiones dan lugar a resultados inesperados debido a su propia naturaleza. Lo que sí puede observarse es que si la condición inicial en  $\xi = 0$  es nula, la derivada de la solución pasa a ser continua.

A la vista de lo anterior se ha analizado un caso simplificado en el que se suprime la delta en la posición, y se ha comprobado que el potencial necesario para que la

ecuación tenga sentido debe ser no real. Debido a esto se puede concluir que el potencial usado para el caso de tener también una delta de Dirac en la posición puede tener que ser imaginario; entonces el hamiltoniano no sería hermítico y la solución no tendría por qué ser normalizable. Un potencial imaginario conlleva tener que utilizar técnicas más sofisticadas de análisis funcional para averiguar su significado físico, pero esto ya es más complicado de lo que se pretende en este trabajo, que es obtener soluciones mediante métodos relativamente sencillos, por lo que este tema sigue abierto a futuras investigaciones.

Por último, se ha intentado hallar la solución exacta en caso de que el coeficiente temporal sea una función arbitraria, pero suficientemente regular, en el tiempo. Se ha obtenido un sistema infinito de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas, para cuya resolución son necesarias otras técnicas de tipo numérico, que se deja planteado para ser abordado en un trabajo posterior. Simplemente mencionar que los resultados hallados dan la solución correcta cuando el potencial es nulo.

# Bibliografía

- [1] S. Ki Baek, S. Do Yi, and M. Kim, *Particle in a box with a time-dependent  $\delta$ -function potential*, Phys. Rev. A **94** (2016) 052124.
- [2] M.L. Glasser, J. Mateo, J. Negro, and L.M. Nieto, *Quantum infinite square well with an oscillating wall*, Chaos, Solitons and Fractals **41** (2009) 2067-2074.
- [3] A. Contreras-Astorga, V. Hussin, *Infinite Square-Well, Trigonometric Pöschl-Teller and Other Potential Wells with a Moving Barrier*, en “Integrability, Supersymmetry and Coherent States”, Ş. Kuru, J. Negro and L.M. Nieto (Eds), en CRM Series in Mathematical Physics, Springer (2019) 285-299.
- [4] C. González-Santander, F. Domínguez-Adame, C.H. Fuentevilla, and E. Diez, *Scattering of massless Dirac particles by oscillating barriers in one dimension*, Phys. Lett. A **378** (2014) 927-930.
- [5] D.F. Martinez and L.E. Reichl, *Transmission properties of the oscillating  $\delta$ -function potential*, Phys. Rev. B **64** (2001) 245315.
- [6] G. Breit, *A Soluble Semiclassical Particle Transfer Problem*, Ann. Phys. **34** (1965) 377-399.
- [7] F. Erman, M. Gadella, and H. Uncu, *The Propagators for  $\delta$  and  $\delta'$  Potentials with Time-Dependent Strengths*, to appear in Front. Phys. (2019).
- [8] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Quantum Mechanics*, Wiley (1992).
- [9] E.T. Whittaker, G.N. Watson, *A Course of Modern Analysis*, Cambridge University Press (1950).
- [10] D.F. Lawden, *Elliptic Functions and Applications*, Collège Press, University of Beijing (1998).
- [11] M. Gadella, L.M Nieto, *Métodos Matemáticos Avanzados para Ciencias e Ingenierías*, Secretariado de Publicaciones Universidad de Valladolid (2000).