



Universidad de Valladolid

Facultad de Ciencias

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

Partículas libres, campos radiativos y fronteras en física cuántica

Autora: Inés Vega González

Tutores: José María Muñoz Castañeda y Lucía

Santamaría Sanz

Índice

1. Introducción	1
2. Desaprendiendo la partícula libre	2
2.1. La partícula libre en el intervalo	5
3. Condiciones de contorno en Mecánica Cuántica no Relativista	7
3.1. Condiciones de contorno de Robin	7
3.2. Condiciones de contorno Cuasiperiódicas	15
3.2.1. Condiciones de contorno Periódicas	17
3.2.2. Teorema de Bloch	19
3.2.3. El efecto Aharonov–Bohm	21
3.3. Conclusiones de los ejemplos	22
4. Teoría Global de Condiciones de Contorno Cuánticas en 1+1	24
4.1. Ejemplos	28
5. Cálculo de la función espectral general	31
5.1. Parametrización de la matriz unitaria	32
5.2. Estados ligados de la partícula libre	33
5.2.1. Extensiones autoadjuntas negativas: estados ligados	38
5.3. Cero modos de extensiones autoadjuntas	41
5.3.1. La extensión de Von Neumann-Krein	42
6. Conclusiones	45
Bibliografía	47
7. Apéndice	49
7.1. Anexo 1: Código de Mathematica para los momentos en C.C. de Robin	49
7.2. Anexo 2: Código de Mathematica para las energías en C.C. de Robin	53

Abstract

We analyse the theory of boundary conditions for a quantum system consisting of a free particle on a closed segment of the real line on 1+1 dimensions. We discuss all the realizations of the free particle system on a finite interval for non-relativistic Quantum Mechanics, using the theory of selfadjoint extensions for Laplace-Beltrami operators. Some well-known particular cases of boundary conditions are studied: Robin, periodic and quasiperiodic conditions. The space of selfadjoint extensions of the free Hamiltonian is shown to have interesting topological properties which are related to the different topological closures on the particle's space (the finite interval). Next, we mention the quantum field theory of the system and how it could be interpreted as a macrocanonical ensemble of harmonic oscillators. Then we mention the modelling of the boundary conditions as the Casimir effect between two parallel flat plates.

Analizamos la teoría de las condiciones de contorno en un sistema cuántico que consiste en una partícula libre en un intervalo cerrado de la recta real en 1+1 dimensiones. Discutimos todas las realizaciones del sistema partícula libre en un intervalo finito para la Mecánica Cuántica no relativista, usando la teoría de extensiones autoadjuntas para operadores de Laplace-Beltrami. Estudiamos algunos casos bien conocidos de condiciones de contorno: condiciones de Robin, periódicas y cuasiperiódicas. Se muestra que el espacio de extensiones autoadjuntas del Hamiltoniano libre tiene interesantes propiedades topológicas relacionadas con los diferentes cierres del espacio de la partícula (el intervalo finito). Después, se menciona la teoría cuántica de campos del sistema y como se puede interpretar como una colectividad macrocanónica de osciladores armónicos. Luego mencionamos el modelaje de las condiciones de contorno como el efecto Casimir entre dos placas plano paralelas.

1. Introducción

En este trabajo se busca una familiarización con técnicas modernas en mecánica cuántica y teoría cuántica de campos mediante el estudio de las interacciones cuánticas debidas a la presencia de fronteras [1, 2, 3].

En primer lugar, en la primera parte del proyecto se espera que, ya disponiendo de una buena base de mecánica cuántica, se desarrolle un estudio general del problema de la partícula libre en mecánica cuántica confinada al intervalo finito $[0, L]$. En esa situación, el Hamiltoniano de la partícula libre,

$$\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

no es esencialmente autoadjunto [4, 5, 6]. Así pues, en la primera parte del trabajo formativo, se espera construir todas las realizaciones del sistema *partícula libre* en el intervalo finito. Para ello, nos familiarizaremos con las condiciones de contorno en mecánica cuántica no relativista, y la teoría de extensiones autoadjuntas para operadores de Laplace-Beltrami [1]. Para profundizar en el conocimiento adquirido en esta parte del trabajo se estudiarán diversos casos particulares bien conocidos en la literatura y de especial relevancia: condiciones Robin, periódicas y cuasiperiódicas. El estudio de dichos casos particulares permitirá entender cómo las condiciones de contorno son también una forma de implementar cambios de topología en el espacio de la partícula (el intervalo finito puede ser entendido en ciertos casos como un círculo de perímetro igual a la longitud de dicho intervalo).

Tras haber comprendido lo expuesto en el párrafo anterior, se estudiarán extensiones autoadjuntas menos estándar, que dan lugar a realizaciones de la partícula libre cuántica donde aparecen estados ligados. Dichas cuantizaciones de la partícula libre son de especial relevancia en el ámbito de los aislantes topológicos [7].

Es bien conocido que todo campo cuántico en interacción con un *background* clásico puede ser interpretado como una colectividad macrocanónica de osciladores armónicos desacoplados [8, 9, 10]. Las frecuencias que caracterizan a la colectividad de osciladores armónicos vienen descritas por raíces cuadradas de los autovalores de un operador de Schrödinger no-relativista, en el caso de campos escalares. De esta forma, genéricamente, para 1+1 dimensiones, el Hamiltoniano de una teoría de campo escalar cuántico en interacción con un *background* clásico puede escribirse en la forma

$$\mathcal{H} = \sum_{\omega} \hbar\omega \left(a^{\dagger}(\omega)a(\omega) + \frac{1}{2} \right),$$

siendo las frecuencias ω sobre las que se extiende la suma, las raíces cuadradas de los autovalores de un operador de Schrödinger no-negativo, dónde para claridad en los cálculos vamos a tomar $\hbar = 1$ en la expresión de \mathbf{H}_0 :

$$\mathbf{H}_b = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2},$$

En esta parte del proyecto se debe comprender de manera profunda este proceso de deducción del Hamiltoniano de la teoría cuántica de campos, empezando por el ejemplo más sencillo, que es el del campo libre en la recta real. Una vez comprendida la cuantización del campo libre como una colectividad macrocanónica de osciladores desacoplados, se estudiará qué realizaciones de la partícula libre en el intervalo finito pueden dar lugar a una teoría cuántica de campos consistente.

Además, dichas teorías serán caracterizadas de forma efectiva, para el caso de teorías de campos con y sin masa. Como aplicación de dicho estudio se estudiará el cálculo del efecto Casimir entre placas plano-paralelas, modeladas por las condiciones de contorno asociadas a las extensiones autoadjuntas válidas en la teoría de campos.

2. Desaprendiendo la partícula libre

Siguiendo los Postulados Estándar de la Mecánica Cuántica aprendidos en cursos anteriores [11], sabemos que una partícula libre de masa m sin espín (en 1+1 no hay espín, porque al moverse en una recta la partícula no puede rotar), moviéndose en la recta real, viene caracterizada por el operador Hamiltoniano:

$$\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (2.1)$$

Este resultado se puede ver que proviene de la teoría de Schrödinger de la Mecánica Cuántica. Partiendo de la definición de que una partícula libre es aquella que sólo tiene energía cinética, porque no está sometida a ningún potencial, podemos estudiar un procedimiento general para calcular la onda asociada a la partícula: la *ecuación de Schrödinger*. Esta debe proporcionar alguna conexión entre los aspectos corpuscular y ondulatorio: el postulado de De Broglie ($\lambda = h/p$ siendo λ la longitud de onda de De Broglie asociada a la onda que dirige el movimiento de la partícula, p su momento lineal y h la *constante de Plank*) debe ser un caso particular y las ecuaciones de Newton deben ser el límite macroscópico. Así se llegó a la siguiente ecuación (en una dimensión):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \quad (2.2)$$

Para resolver esta ecuación vamos a usar el método de separación de variables, en que la solución $\psi(x, t)$ se separa en forma de productos de funciones de cada una de las variables: $\psi(x, t) = \phi(x)\varphi(t)$. Así es como la podemos separar en dos ecuaciones, asumiendo que la energía potencial no depende del tiempo. Una de ellas es la *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad (2.3)$$

siendo E la energía de la partícula, y se denomina Hamiltoniano al operador que actúa sobre $\phi(x)$ en la parte izquierda de la ecuación:

$$\mathbf{H}' = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

En el caso de la partícula libre ($V(x) = 0$), se llega al resultado de la ecuación (2.1). Para simplificar los cálculos, se fija un sistema de unidades en el que $\hbar = 1$, así:

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (2.4)$$

La interpretación probabilística de la función de onda $\psi(x, t)$ de una partícula viene dada por: $|\psi(x, t)|^2 dx$, y representa la probabilidad de encontrar, en un tiempo t , a la partícula en una zona de la recta real dx alrededor del punto x [11]. La probabilidad total de encontrar a la partícula en cualquier parte del espacio es igual a 1, así:

$$\int_{\mathbb{R}} dx |\psi(x, t)|^2 = 1$$

Donde la integración se extiende sobre toda la recta real. Esto lleva a la conclusión de que los estados cuánticos están en el *conjunto de funciones de cuadrado integrable*. Estas se definen como las funciones que hacen que la integral anterior sea finita. Este conjunto se llama \mathcal{L}^2 y tiene estructura de un espacio de Hilbert.

Este conjunto de funciones puede actuar sobre diferentes intervalos. El espacio que va a ser relevante en este caso es $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, que viene dado por las funciones de cuadrado integrable en \mathbb{R} , correspondiendo con el espacio de estados en la interpretación tradicional de la mecánica cuántica. Para cada par de elementos de este conjunto $\phi, \varphi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, podemos asociarles un número complejo llamado *producto escalar*:

$$\langle \phi, \varphi \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}} dx \phi^*(x) \varphi(x) \quad (2.5)$$

A partir de esta definición, surge otra muy relevante, la llamada *norma* de una función:

$$\|\phi\|_{\mathcal{L}^2} \equiv \langle \phi, \phi \rangle^{1/2} = \left(\int_{\mathbb{R}} dx |\phi(x)|^2 \right)^{1/2} \quad (2.6)$$

Por la propia definición de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, surge la condición de **norma finita**, que indica que para cualquier función $\phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, se cumple que su norma (2.6) es finita.

El segundo postulado de la Mecánica Cuántica dice que todo operador que describe una cantidad física medible tiene que ser un observable, es decir, autoadjunto. En el caso del Hamiltoniano, se sabe que es un observable porque corresponde a la cantidad física medible de la energía. Por lo tanto, hay que comprobar que el Hamiltoniano (2.4) es *autoadjunto*, es decir, que sea un operador hermítico, cumpliendo que es igual a su operador adjunto o conjugado ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$).

Para comprobarlo, basta con tomar dos funciones $\varphi, \phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$. Hay que comprobar que se cumple la condición:

$$\langle \varphi | \mathbf{H} | \phi \rangle = \langle \phi | \mathbf{H} | \varphi \rangle^*$$

O, en una nomenclatura más matemática:

$$\langle \varphi, \mathbf{H}\phi \rangle = \langle \mathbf{H}\varphi, \phi \rangle \quad (2.7)$$

En representación de coordenadas esto es:

$$\langle \varphi, \mathbf{H}\phi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \varphi^*(x) \left(\frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \phi(x) = \frac{-1}{2m} \int_{\mathbb{R}} \varphi^* \phi'' dx$$

Aplicando la integración por partes:

$$\langle \varphi, \mathbf{H}\phi \rangle = \frac{-1}{2m} \left[\varphi^* \phi' \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\mathbb{R}} \phi' (\varphi^*)' dx \right]$$

Como, por definición, φ, ϕ son funciones de cuadrado integrable en \mathbb{R} , tienen *norma finita* (norma \mathcal{L}^2), lo que impone que tienden a cero suficientemente rápido cuando $x \rightarrow \pm\infty$. Por lo tanto, el primer sumando a la derecha de la igualdad se va a anular. Ahora, para resolver la integral que aparece en el segundo sumando, vamos a volver a aplicar la integración por partes:

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \mathbf{H}\phi \rangle &= \frac{1}{2m} \left[(\varphi^*)' \phi \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\mathbb{R}} \phi (\varphi^*)'' dx \right] = \int_{\mathbb{R}} dx \phi(x) \left(\frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \varphi^*(x) \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx \left(\frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \varphi^*(x) \phi(x) = \langle \mathbf{H}\varphi, \phi \rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

Aquí el primer sumando a la derecha de la primera igualdad vuelve a dar cero, a causa del requerimiento de norma finita sobre φ, ϕ . Se comprueba que se cumple la condición de que \mathbf{H} sea autoadjunto, como queríamos demostrar.

El tercer postulado nos dice que los únicos posibles resultados al medir una cantidad física, en este caso la energía, son los dados por los autovalores del observable correspondiente, en este caso el Hamiltoniano. Por eso ahora se va a proceder a calcular los autovalores y autovectores del mismo. Con la información que tenemos de resolución de ecuaciones en derivadas parciales, se ve que:

$$\left\{ \psi_k = \mathcal{C} e^{ikx} \right\}_{k \in \mathbb{R}} \quad (2.9)$$

este conjunto de funciones forman una base de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ y además son una base de estados propios de \mathbf{H} , siendo las energías asociadas a los mismos:

$$E_k = \frac{k^2}{2m} > 0 \quad \forall k \in \mathbb{R} \quad (2.10)$$

Para ver que (2.9) son realmente autofunciones del hamiltoniano (2.4), podemos resolver la ecuación en autovalores $\mathbf{H}\psi_k = E_k\psi_k$. En este caso, la ecuación se reduce a:

$$-\frac{d^2\psi_k}{dx^2} = 2mE\psi_k \quad (2.11)$$

Como tenemos la segunda derivada de la función igual a menos la función multiplicada por un factor positivo (aunque la energía E puede ser negativa en estados ligados, que en principio no están presentes en la partícula libre), la solución general será una exponencial compleja, es decir, una onda plana propagándose en la dirección positiva o negativa:

$$\psi_k = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \text{con} \quad k = \sqrt{2mE} \quad (2.12)$$

Siendo A y B constantes. Esa expresión de ψ_k es equivalente a la de (2.9), y además con la expresión de k se ve cómo se despeja la energía. La interpretación de los estados dados en (2.9) es bien sabida por física de ondas:

- $k > 0$: onda que viaja de izquierda a derecha (**diestra**)
- $k < 0$: onda que viaja de derecha a izquierda (**zurda**)

Así tenemos identificados todos los componentes para el caso de la partícula libre en la recta real.

2.1. La partícula libre en el intervalo

Si ahora nos planteamos las mismas cuestiones que estudiamos en el caso de la partícula libre en toda la recta real, pero para una partícula libre en el intervalo finito $[0, L]$ con $(0 < L < \infty)$, vemos que los resultados cambian. Se puede probar a tomar el mismo Hamiltoniano:

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (2.13)$$

Por la interpretación estadística de la Mecánica Cuántica, los estados vienen descritos por el espacio de funciones $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$. Este espacio, a diferencia del caso visto en el apartado anterior $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, que viene dado por las funciones de cuadrado integrable en toda la recta real \mathbb{R} , sólo contiene las funciones de cuadrado integrable en el intervalo $[0, L]$. Para cada par de elementos de este conjunto $\phi, \varphi \in \mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$, la definición de producto escalar es distinta, ya que sólo se mueven en un intervalo de la recta real y, por lo tanto, sólo integraremos sobre este:

$$\langle \phi, \varphi \rangle \equiv \int_0^L dx \phi^*(x) \varphi(x) \quad (2.14)$$

A partir de esta definición, surge la de la *norma* de una función:

$$\| \phi \|_{\mathcal{L}^2} \equiv \langle \phi, \phi \rangle^{1/2} = \left(\int_0^L dx |\phi(x)|^2 \right)^{1/2} \quad (2.15)$$

En el espacio de funciones $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$, surge la condición de **norma finita**. Esta condición no implica las mismas cosas que la del $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, ya que en este caso la integral que es finita es sobre el intervalo $[0, L]$, no sobre toda la recta real, lo que no es una condición suficiente para decir que las funciones se anulan en el infinito, sólo sabemos que sus valores en los bordes del intervalo pueden ser finitos y que la norma sea finita.

Se puede comprobar que \mathbf{H} *no es un operador autoadjunto en $[0, L]$* , ya que cuando integramos por partes dos veces, al igual que en el caso de la partícula libre en todo \mathbb{R} , la fórmula que obtenemos para cualquier par de funciones $f, g \in \mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$ es distinta. Repitiendo el procedimiento usado en el apartado anterior, hay que comprobar si se cumple la condición:

$$\langle f, \mathbf{H}g \rangle = \langle \mathbf{H}f, g \rangle$$

En representación de coordenadas esto es:

$$\langle f, \mathbf{H}g \rangle = \int_0^L dx f^*(x) \left(\frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) g(x) = \frac{-1}{2m} \int_0^L f^* g'' dx$$

Aplicando la primera integración por partes:

$$\langle f, \mathbf{H}g \rangle = \frac{-1}{2m} \left[f^* g' \Big|_0^L - \int_0^L g' (f^*)' dx \right]$$

Aquí aparece la primera diferencia entre los dos conjuntos de funciones de cuadrado integrable. En este caso, el primer sumando a la derecha de la igualdad no tiene por qué anularse, ya que la condición de norma finita para las funciones f y g no indica necesariamente que las funciones tengan que anularse en los extremos del intervalo, ya que el intervalo que consideramos está en

$[0, L]$ y no en toda la recta real. La condición de norma finita sólo indica que la integral del módulo al cuadrado de la función es finito entre los extremos del intervalo, pero no es información suficiente para decir que esa función tenga que tender a cero en los extremos.

Para resolver la integral del segundo sumando a la derecha de la igualdad, vamos a volver a aplicar la integración por partes:

$$\begin{aligned}
\langle f, \mathbf{H}g \rangle &= \frac{-1}{2m} \left[[f^* g']_0^L - [(f^*)' g]_0^L + \int_0^L g (f^*)'' dx \right] \\
&= \frac{-1}{2m} \left[[f^* g' - (f^*)' g]_0^L + \int_0^L dx g(x) \frac{d^2}{dx^2} f^*(x) \right] \\
&= \frac{-1}{2m} [f^* g' - (f^*)' g]_0^L + \int_0^L dx g(x) \left(\frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) f^*(x) \\
&= \frac{-1}{2m} [f^* g' - (f^*)' g]_0^L + \int_0^L dx \left(\frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) f^*(x) g(x) \\
&= \frac{-1}{2m} [f^* g' - (f^*)' g]_0^L + \langle \mathbf{H}f, g \rangle
\end{aligned}$$

Es decir, hemos llegado al resultado:

$$\boxed{\langle f, \mathbf{H}g \rangle = \frac{-1}{2m} [f^* g' - (f^*)' g]_0^L + \langle \mathbf{H}f, g \rangle} \quad (2.16)$$

La fórmula es formalmente igual a la del caso anterior, la diferencia está en que el primer sumando a la derecha de la igualdad no se hace cero. Ya que el intervalo $[0, L]$ es finito, las funciones de $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$ no tienen porque anularse en $x = 0, L$. Se llega por tanto a la conclusión de que, a priori, los mismos ingredientes que identifican la partícula libre en \mathbb{R} , no son suficientes para definir la partícula libre en $[0, L]$, debido a que dan lugar a un operador Hamiltoniano no autoadjunto, condición necesaria para que sea un observable.

Si desarrollamos el término que no se anula, llegamos a una expresión que nos será útil más tarde:

$$\frac{-1}{2m} [f^* g' - (f^*)' g]_0^L = \frac{-1}{2m} [f^*(L)g'(L) - (f^*)'(L)g(L) - f^*(0)g'(0) + (f^*)'(0)g(0)] \quad (2.17)$$

Ahora el dilema que se nos plantea es ver *qué es la partícula libre en $[0, L]$* , o lo que es lo mismo, encontrar un Hamiltoniano que sea autoadjunto para definirla. Principalmente nos encontramos ante dos posibles opciones: que el Hamiltoniano tenga que cambiar o que las condiciones que identifican las funciones sean más restringidas. Que al Hamiltoniano se le añadan términos (un potencial) iría en contra del propósito que tenemos de que la partícula en el intervalo siga siendo libre, por lo que el cambio deberá venir de conservar la misma forma básica del Hamiltoniano, pero añadiéndole ciertas condiciones al espacio de funciones asociado que lo restrinja. Esto será desarrollado en posteriores apartados.

3. Condiciones de contorno en Mecánica Cuántica no Relativista

En el apartado anterior se llegó a la conclusión de que el operador Hamiltoniano debía conservar su forma (2.13), ya que al añadir un potencial al operador, perdería su definición de partícula libre. La única opción que queda para asegurar que el Hamiltoniano en el intervalo $[0, L]$ sea autoadjunto consistirá en forzar a que tanto las funciones como sus derivadas cumplan determinadas condiciones en la frontera del intervalo, es decir, aplicar unas condiciones de contorno determinadas.

En esta parte se verán algunas realizaciones bien conocidas para las que se cumple que el Hamiltoniano es autoadjunto. Imponiendo ciertas condiciones de contorno al conjunto de funciones $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$ en el intervalo, se encuentran casos en los que el Hamiltoniano de la partícula libre en la recta real también será autoadjunto en el intervalo. Los casos más representativos a estudiar son las condiciones de contorno de Robin, que consisten de una interpolación entre las condiciones de contorno de Dirichlet y las de Neumann, y posteriormente se verán las condiciones de contorno periódicas y cuasi-periódicas, que tendrán resultados físicos muy interesantes.

3.1. Condiciones de contorno de Robin

En este apartado se va a tratar de obtener las autofunciones y autovalores del Hamiltoniano que se ha planteado en (2.13), pero para el intervalo $[0, L]$. Se recuerda que para simplificar los cálculos se va a tomar un sistema de unidades tal que: $\hbar = 1$. Así, se trabaja con:

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Las *condiciones de contorno (C.C.) de Robin* generales para un intervalo $[0, L]$ se caracterizan por que las funciones sigan las siguientes ecuaciones:

$$\begin{cases} \partial_n f(0) + g_1 f(0) = 0 \\ \partial_n f(L) + g_2 f(L) = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

Siendo los coeficientes g_1, g_2 una función o una constante, dependiendo del caso particular en el que nos encontremos, y ∂_n la derivada normal en la dirección saliente al borde del intervalo.

Se dice que las C.C. de Robin son una interpolación entre las *condiciones de Dirichlet* y las de *Neumann*, y esto se ve claramente en la forma de estas últimas. Para una función ψ perteneciente a $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$:

$$\text{C.C. Dirichlet : } \begin{cases} \psi(0) = 0 \\ \psi(L) = 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

$$\text{C.C. Neumann : } \begin{cases} \psi'(0) = 0 \\ \psi'(L) = 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

Estas expresiones se pueden ver como un caso particular de las C.C. de Robin (3.1). En el caso de las C.C. de Dirichlet se corresponden con dividir las dos ecuaciones entre g_1 y g_2 respectivamente, y luego tomar $g_1, g_2 \rightarrow \infty$. En el caso de las C.C. de Neumann, se corresponde con tomar $g_1, g_2 = 0$. Dirichlet y Neumann son los dos casos extremos de las C.C. de Robin.

En el caso de la recta real, la derivada normal sería de la forma:

$$\begin{cases} -f'(0) + g_1 f(0) = 0 \\ f'(L) + g_2 f(L) = 0 \end{cases}$$

El caso particular que aquí se va a tratar, g_1, g_2 son tales que:

$$\begin{cases} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) f'(0) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) f(0) = 0 \\ \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) f'(L) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) f(L) = 0 \end{cases} \quad (3.4)$$

donde tomamos α un número real ($\alpha \in \mathbb{R}$). En este caso, se pueden encontrar las C.C. de Dirichlet al tomar $\alpha = \pi(2n + 1), n = 0, 1, 2, \dots$, y las C.C. de Neumann al tomar $\alpha = 2\pi n, n = 0, 1, 2, \dots$

Primero vamos a comprobar que $\forall g, f$ tales que verifican las C.C. de Robin, se cumple la relación:

$$\boxed{f^* g' - (f^*)' g|_0^L = 0} \quad (3.5)$$

Que se cumpla esta relación indica que, en este caso, el Hamiltoniano (2.13) sería autoadjunto, según se ve en la fórmula (2.16). Con la primera de las C.C. podemos despejar $f(0)$:

$$f(0) = f'(0) \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)} = f'(0) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad (3.6)$$

Y haciendo su conjugado hermítico:

$$f^*(0) = (f^*)'(0) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad (3.7)$$

Lo mismo para la segunda condición de (3.4) nos da:

$$f(L) = -f'(L) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad (3.8)$$

$$f^*(L) = -(f^*)'(L) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad (3.9)$$

Para la función g las condiciones de contorno son las mismas, por lo que nos quedaría lo mismo. Ahora sustituyendo estos términos en la expresión de (3.5), evaluados en 0 y L :

$$[f^* g' - (f^*)' g]_0 = f^*(0)g'(0) - (f^*)'(0)g(0) = (f^*)'(0) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cdot g'(0) - (f^*)'(0) \cdot g'(0) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) = 0$$

$$[f^* g' - (f^*)' g]_L = f^*(L)g'(L) - (f^*)'(L)g(L) = -(f^*)'(L) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cdot g'(L) + (f^*)'(L) \cdot g'(L) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) = 0$$

Por tanto el resultado se cumple:

$$f^* g' - (f^*)' g|_0^L = [f^* g' - (f^*)' g]_L - [f^* g' - (f^*)' g]_0 = 0$$

Una vez comprobado que con las condiciones de contorno de Robin se cumple que el Hamiltoniano de la partícula en el intervalo (2.13) es autoadjunto, podemos pasar a la segunda parte del procedimiento, que es resolver sus autofunciones y autovalores. Este Hamiltoniano es igual al de la partícula libre (2.4), entonces el proceso de obtener sus autofunciones será el mismo.

La energía (2.10) corresponde con los autovalores, que se identifican con el índice k , $\forall k \in \mathbb{R}$. Así la ecuación en autovalores será de la forma:

$$\mathbf{H} |\psi_k\rangle = \frac{k^2}{2m} |\psi_k\rangle \quad (3.10)$$

Que aplicando el Hamiltoniano, se puede traducir en una ecuación que sabemos resolver, igual que en el caso de la partícula libre:

$$-\psi_k'' = k^2 \psi_k \Rightarrow \psi_k'(x) = ik \left(A e^{ikx} - B e^{-ikx} \right) \Rightarrow \psi_k(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (3.11)$$

Para encontrar los valores de los coeficientes A y B se usan las condiciones de contorno (3.4), aplicadas a las funciones $f \equiv \psi_k$. Así, la primera condición (la aplicada en el punto $x = 0$) se puede desarrollar en:

$$\begin{aligned} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \left[ik \left(A e^{ik \cdot 0} - B e^{-ik \cdot 0} \right) \right] - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \left[A e^{ik \cdot 0} + B e^{-ik \cdot 0} \right] \\ = ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) [A - B] - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) [A + B] = 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

Para la segunda condición (la aplicada en el punto $x = L$)

$$\begin{aligned} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \left[ik \left(A e^{ik \cdot L} - B e^{-ik \cdot L} \right) \right] + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \left[A e^{ik \cdot L} + B e^{-ik \cdot L} \right] \\ = ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) [A e^{ikL} - B e^{-ikL}] + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) [A e^{ikL} + B e^{-ikL}] = 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Estas dos ecuaciones forman un sistema que se puede expresar matricialmente:

$$\mathbf{M}_R(k) \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

dónde $\mathbf{M}_R(k)$ es una matriz 2×2 . Para que el sistema de ecuaciones lineales homogéneas representado por la matriz tenga una solución no trivial, se debe cumplir la condición:

$$\boxed{\det [\mathbf{M}_R(k)] = 0} \quad (3.15)$$

Como el determinante de $\mathbf{M}_R(k)$ es necesario que sea cero, eso nos indica que las ecuaciones no van a ser linealmente independientes, lo que nos indica que no podemos encontrar el valor de los coeficientes A y B , pero sí se puede despejar uno en función del otro con una de las ecuaciones del sistema.

El siguiente paso a seguir será encontrar la matriz $\mathbf{M}_R(k)$ y estudiar las condiciones que aparecen al hacer su determinante igual a cero. Partiendo de las ecuaciones (3.12) y (3.13), podemos despejar los coeficientes A y B . De la ecuación (3.12):

$$\begin{aligned} ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) A - ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) B - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) A - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) B \\ = \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] A + \left[-ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] B = 0 \end{aligned}$$

De la ecuación (3.13):

$$\begin{aligned}
& ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{ikL} A - ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-ikL} B + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{ikL} A + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-ikL} B \\
&= \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{ikL} + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{ikL} \right] A + \left[-ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-ikL} + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-ikL} \right] B \\
&= \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{ikL} A + \left[-ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{-ikL} B = 0
\end{aligned}$$

Así, escribiendo estas ecuaciones en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & -ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{ikL} & \left[-ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{-ikL} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Así, la matriz $\mathbf{M}_R(k)$ buscada será:

$$\mathbf{M}_R(k) = \begin{pmatrix} ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & -ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{ikL} & \left[-ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{-ikL} \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Ahora que ya es conocida, se puede estudiar en qué casos el sistema de ecuaciones tendrá solución no trivial, igualando su determinante a cero:

$$\begin{vmatrix} ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & -ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{ikL} & \left[-ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{-ikL} \end{vmatrix} = 0$$

Resolviendo este determinante:

$$\begin{aligned}
\det [\mathbf{M}_R(k)] &= \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] \cdot \left[-ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{-ikL} \\
&\quad - \left[-ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] \cdot \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{ikL} \\
&= - \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right]^2 e^{-ikL} + \left[ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right]^2 e^{ikL} \\
&= \left[(ik)^2 \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + 2ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{ikL} \\
&\quad - \left[(ik)^2 \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) - 2ik \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] e^{-ikL}
\end{aligned}$$

Para continuar, se pueden usar algunas conocidas identidades trigonométricas:

$$\cos^2 x = \frac{1 + \cos(2x)}{2} \quad ; \quad \sin^2 x = \frac{1 - \cos(2x)}{2} \quad ; \quad \sin(2x) = 2 \sin x \cos x$$

Así, el determinante:

$$\begin{aligned}
\det [\mathbf{M}_R(k)] &= \left[(ik)^2 \frac{1 + \cos \alpha}{2} + \frac{1 - \cos \alpha}{2} + ik \sin \alpha \right] e^{ikL} - \left[(ik)^2 \frac{1 + \cos \alpha}{2} + \frac{1 - \cos \alpha}{2} - ik \sin \alpha \right] e^{-ikL} \\
&= \left[\frac{(ik)^2 + 1}{2} + \frac{(ik)^2 - 1}{2} \cos \alpha + ik \sin \alpha \right] e^{ikL} - \left[\frac{(ik)^2 + 1}{2} + \frac{(ik)^2 - 1}{2} \cos \alpha - ik \sin \alpha \right] e^{-ikL} \\
&= \frac{(ik)^2 - 1}{2} (e^{ikL} - e^{-ikL}) \cos \alpha + ik (e^{ikL} + e^{-ikL}) \sin \alpha + \frac{(ik)^2 + 1}{2} (e^{ikL} - e^{-ikL})
\end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la relación $e^x = \cos x + i \sin x$ y que $\cos(-x) = \cos x$ y $\sin(-x) = -\sin x$:

$$\begin{aligned} \det [\mathbf{M}_R(k)] &= \frac{(ik)^2 - 1}{2} (2i \sin(kL)) \cos \alpha + ik(2 \cos(kL)) \sin \alpha + \frac{(ik)^2 + 1}{2} (2i \sin(kL)) \\ &= i [(ik)^2 - 1] \sin(kL) \cos \alpha + i 2k \cos(kL) \sin \alpha + i [(ik)^2 + 1] \sin(kL) \end{aligned}$$

Como i es la unidad imaginaria: $i^2 = -1$

$$\det [\mathbf{M}_R(k)] = -i (k^2 + 1) \sin(kL) \cos \alpha + i 2k \cos(kL) \sin \alpha - i (k^2 - 1) \sin(kL)$$

Ajustando términos, para que se anule el determinante de $\mathbf{M}_R(k)$, se debe cumplir la ecuación:

$$\boxed{(k^2 + 1) \sin(kL) \cos \alpha - 2k \cos(kL) \sin \alpha + (k^2 - 1) \sin(kL) = 0} \quad (3.17)$$

Tenemos que resolver esta ecuación para poder sacar los valores de α y k para los que hay solución $\forall L = 0$. En este caso α es el parámetro que caracteriza las condiciones de contorno, y por tanto puede variar según el caso. El valor que interesa obtener es k , porque según lo visto en (2.10), la energía (los autovalores del Hamiltoniano autoadjunto) depende del valor de k al cuadrado. Si se obtienen los valores de k en función de las α , se tendrán los distintos autovalores en función del parámetro que determinan las condiciones de contorno de Robin. Vamos a definir su **función espectral** como:

$$h_R(k) \equiv (k^2 + 1) \sin(kL) \cos \alpha - 2k \cos(kL) \sin \alpha + (k^2 - 1) \sin(kL) \quad (3.18)$$

Lo primero que se hace notar es que si el valor de k tiende a cero, h_R se anulará para todos los posibles valores de α , resolviéndose así la ecuación. Ya se obtiene una raíz de ese polinomio, $k = 0$, pero no va a ser siempre un autovalor. Esto se ve en las C.C. de Dirichlet, caso particular de las C.C. de Robin, en el que sus autovalores son conocidos. El parámetro α que caracteriza las C.C. de Robin se mueve entre los valores $[0, \pi]$, porque fuera de esos valores la función $k(\alpha)$ se repite. Antes se vio que al tomar $\alpha = \pi$ en (3.4), se encontraban las C.C. de Dirichlet. Aplicando ese valor de α a la función espectral h_R y estudiar sus ceros se obtiene:

$$\sin(kL) = 0 \quad (3.19)$$

Su forma se simplifica y es fácil de resolver, llegando a unos autovalores con:

$$k_n^{(D)} = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.20)$$

Que en ningún caso se puede encontrar el autovalor $k = 0$. De hecho, el autovalor con $k = 0$ sólo está presente en el caso de las C.C. de Neumann, que aparecían al tomar $\alpha = 0$ en la expresión (3.4) de las C.C. de Robin. Su función espectral pasa a ser:

$$k^2 \sin(kL) = 0 \quad (3.21)$$

Resolviéndola se llega a los valores:

$$k_n^{(N)} = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.22)$$

Dónde vemos que para $n = 0$ sí se obtiene el $k = 0$. Esta situación es conocida como el **cero modo** de las C.C. de Robin.

Si se trata de resolver la ecuación (3.17) tal y como está escrita, el cero modo nos impedirá ver el resto de los autovalores. Para evitar esta situación, y que el programa ignore el cero modo, se define una nueva función espectral:

$$f_R(k) \equiv \frac{h_R(k)}{k} = \frac{(k^2 + 1) \sin(kL) \cos \alpha - 2k \cos(kL) \sin \alpha + (k^2 - 1) \sin(kL)}{k} \quad (3.23)$$

Las C.C. de Robin para valores de $\alpha = 0$ coinciden con las C.C. de Neumann, y para $\alpha = \pi$ coinciden con las C.C. de Dirichlet. Hay varios valores de k correspondientes esos valores de α , según se vio en las ecuaciones (3.20) y (3.22). Estos se conocen como *estados excitados*, y están degenerados según un índice que se ha llamado n , que a su vez corresponderán con diversos niveles de energía. Como los valores de α entre los que se mueven las C.C. de Robin ($\alpha \in [0, \pi]$) están comprendidos entre las C.C. de Neumann y Dirichlet, es lógico pensar que, si $k_n(\alpha)$ es una función continua, los valores de k_n para las C.C. de Robin van a estar comprendidos entre los valores de k_n para las C.C. de Neumann y Dirichlet, y degenerados también. Además está demostrado que la distancia máxima entre niveles de k es $k_n(\alpha) = \pi/L$.

El nivel fundamental estará comprendido entre los valores de k_0 de las primeras C.C. de Neumann y Dirichlet, y así sucesivamente. Como vemos, sólo se puede cumplir que el cero sea autovalor cuando la autofunción es cero, es decir, el resultado trivial, a no ser que sea el estado fundamental de las C.C. de Neumann.

Se va a tratar de resolver las ecuaciones espectrales analítica o semianalíticamente, representando parte del espectro de las k y de las energías mediante el uso del software **Wolfram Mathematica**. Se puede introducir $f_R = 0$ en este y así lograr encontrar los autovalores. Como el valor de L no es conocido, vamos a tomar $L = 1$ en f_R para simplificar los cálculos. El proceso para resolver se puede afrontar desde dos vías diferentes.

El primero de estos caminos consiste en usar la función **ContourPlot**, de la forma que se ve en el anexo 7.1. Esta función encuentra las soluciones a la ecuación $f_R = 0$, añadiendo los valores de α entre los que nos movemos, que ya se vio que por las condiciones de Dirichlet y Neumann son $\alpha = [0, \pi]$. El valor de k depende del estado excitado (valor de n) en el que se esté. Sabemos que el estado fundamental (que se puede denominar como k_0) está entre los valores fundamentales de la k para las C.C. de Neumann (3.22) y de Dirichlet (3.20), 0 y π . Se define con un *if* una función que devuelve un valor nulo cuando la k esté fuera de ese intervalo, y la función espectral cuando k esté en el intervalo deseado. Lo que hace a posteriori el **ContourPlot** es representar las curvas donde dicha función se anula. Este proceso se puede repetir para los siguientes estados excitados: repitiendo lo anterior para el primer estado excitado (k_1), en este caso el intervalo está entre π y 2π ; lo mismo para el segundo estado excitado (k_2), ahora el intervalo está entre 2π y 3π . La representación de estos estados se incluye en la figura 1.

Observando los resultados obtenidos en esta gráfica, se observan los valores esperados para las C.C. de Dirichlet ($\alpha = \pi, k_0 = \pi$) y C.C. de Neumann ($\alpha = 0, k_0 = 0$).

Usando el otro de los métodos mencionados, nos permite encontrar una tabla con los valores de los k para cada α , antes de ser interpolados. El comando que ofrece esta información es el **FindInstance**. El código se encuentra en el anexo 7.1. Se estudian los ceros de la función espectral f_R para valores de α fijos entre 0 y π . Una vez obtenidos los valores de los distintos k excitados, se usa el comando **FindInstance** para resolver la ecuación. Con los valores discretos obtenidos, se puede realizar una interpolarización para sacar la forma de la curva.

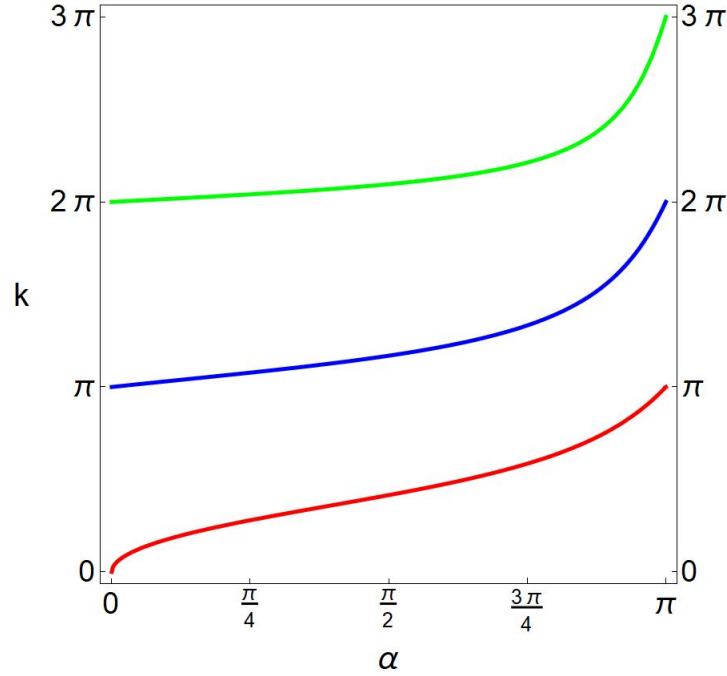


Figura 1: Gráfica representado los valores de los momentos k en sus diferentes estados excitados, en función de la variable α de las condiciones de contorno de Robin, obtenidos a partir de la ecuación espectral $f_R(k) = 0$, para una partícula libre en el intervalo $[0, L = 1]$ de la recta real, definida por el Hamiltoniano autoadjunto (2.13) y las condiciones de contorno (3.4). En rojo se muestra el estado fundamental, en azul el primer estado excitado y en verde el segundo.

Para sacar la curva, el método de `ContourPlot` es más efectivo, pero el `FindInstance` permite sacar una tabla de valores. Así, tomando 10 valores de α fijos y equidistantes entre 0 y π , los siguientes valores de k son obtenidos:

α	k_0	k_1	k_2
0	0	π	2π
$\frac{\pi}{10}$	0.555501	3.2393	6.33319
$\frac{\pi}{5}$	0.784938	3.33579	6.38488
$\frac{3\pi}{10}$	0.968563	3.43603	6.44107
$\frac{2\pi}{5}$	1.13712	3.5458	6.50562
$\frac{\pi}{2}$	1.30654	3.6732	6.58462
$\frac{3\pi}{5}$	1.49094	3.83136	6.68905
$\frac{7\pi}{10}$	1.70883	4.04505	6.84189
$\frac{4\pi}{5}$	1.99251	4.369	7.10113
$\frac{9\pi}{10}$	2.41183	4.95283	7.6617
π	π	2π	3π

Al observar estos valores y cotejarlos con la gráfica de la figura 1, se ve que los valores coinciden. Estos valores se pueden interpolar, y saldría una gráfica muy similar.

Una vez obtenidas las relaciones de $k(\alpha)$, se pueden sacar los autovalores del Hamiltoniano autoadjunto (2.13), que son la energía por definición. La expresión de esta es la vista en (2.10). Se puede encontrar una explicación física del valor de k si pensamos en la relación de la energía y el momento:

$$E_k = \frac{k^2}{2m} \quad , \quad E = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad |\vec{p}| \propto k$$

Así, se puede considerar k como la representación del momento de la partícula libre. Para representar los autovalores (energía de la partícula libre), como es proporcional a k^2 , se saca usando el comando `ContourPlot` como antes (ver anexo 7.2). Para ello se resuelve la ecuación $f_R(E) = 0$, pero en vez de en función de k , irá en función de E ($k \equiv \sqrt{E}$). Se llegará a una función de la forma de la figura 2:

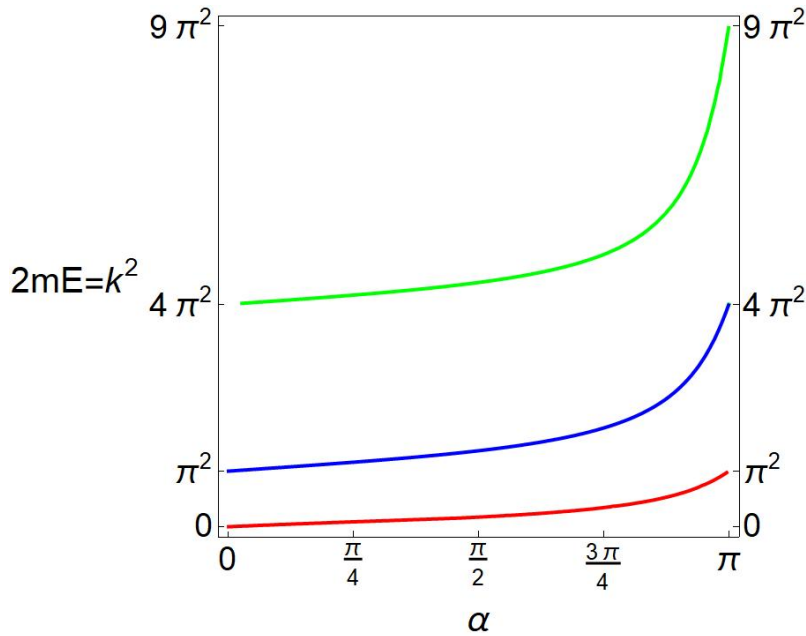


Figura 2: Gráfica representado los autovalores (o energías) del Hamiltoniano autoadjunto (2.13) en función de la variable α de las condiciones de contorno de Robin (3.4), obtenidos a partir de la ecuación espectral $f_R(E) = 0$, para una partícula libre en el intervalo $[0, L = 1]$ de la recta real. En rojo se muestra el estado fundamental, en azul el primer estado excitado y en verde el segundo.

3.2. Condiciones de contorno Cuasiperiódicas

En este ejemplo se va a trabajar con el Hamiltoniano simplificado en el intervalo $[0, L]$, al igual que en apartados anteriores:

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Las condiciones de contorno (C.C.) *Cuasiperiódicas* tienen la expresión:

$$\begin{cases} \psi(0) = e^{i\theta} \psi(L) \\ \psi'(0) = e^{i\theta} \psi'(L) \end{cases} \quad (3.24)$$

Siendo ψ los estados descritos por el espacio $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$. Las C.C. quasiperiódicas se parecen a las periódicas en que iguala los valores de las funciones y sus derivadas en un extremo con los del otro, pero introduciendo un *cambio de fase* $e^{i\theta}$, siendo θ una variable.

Las autofunciones del Hamiltoniano son de la forma $\psi_k(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$. Para encontrar los autovalores, se vuelve a seguir el camino seguido en las C.C. de Robin, buscando la ecuación espectral que nos permita despejar el momento k en función de los parámetros que caracterizan las C.C. quasiperiódicas, en este caso θ . Se procede a sustituir la autofunción general en las C.C. y tratar de ponerlo en forma matricial. De la primera ecuación de (3.24):

$$A e^{ik \cdot 0} + B e^{-ik \cdot 0} = e^{i\theta} (A e^{ik \cdot L} + B e^{-ik \cdot L}) \Rightarrow [1 - e^{i\theta} e^{ikL}] A + [1 - e^{i\theta} e^{-ikL}] B = 0$$

Y la segunda:

$$ik (A e^{ik \cdot 0} - B e^{-ik \cdot 0}) = e^{i\theta} [ik (A e^{ik \cdot L} - B e^{-ik \cdot L})] \Rightarrow [1 - e^{i\theta} e^{ikL}] A + [-1 + e^{i\theta} e^{-ikL}] B = 0$$

Así, escribiendo estas ecuaciones en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} 1 - e^{i\theta} e^{ikL} & 1 - e^{i\theta} e^{-ikL} \\ 1 - e^{i\theta} e^{ikL} & -1 + e^{i\theta} e^{-ikL} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Así, la matriz $\mathbf{M}_{qp}(k)$ buscada será:

$$\mathbf{M}_{qp}(k) = \begin{pmatrix} 1 - e^{i\theta} e^{ikL} & 1 - e^{i\theta} e^{-ikL} \\ 1 - e^{i\theta} e^{ikL} & -1 + e^{i\theta} e^{-ikL} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Ahora que ya es conocida, se puede estudiar en qué casos el sistema de ecuaciones tendrá solución no trivial, igualando su determinante a cero:

$$\begin{vmatrix} 1 - e^{i\theta} e^{ikL} & 1 - e^{i\theta} e^{-ikL} \\ 1 - e^{i\theta} e^{ikL} & -1 + e^{i\theta} e^{-ikL} \end{vmatrix} = 0$$

Resolviendo este determinante:

$$\begin{aligned} \det [\mathbf{M}_{qp}(k)] &= [1 - e^{i\theta} e^{ikL}] \cdot [-1 + e^{i\theta} e^{-ikL}] - [1 - e^{i\theta} e^{-ikL}] \cdot [1 - e^{i\theta} e^{ikL}] \\ &= -4e^{i\theta} [\cos(\theta) - \cos(kL)] \end{aligned}$$

Así se llega a la **ecuación espectral** de las C.C. cuasiperiódicas:

$$\boxed{\cos(\theta) - \cos(kL) = 0} \quad (3.26)$$

Esta ecuación es más sencilla que en el caso de las C.C. de Robin, pero igualmente hay que resolverla para poder sacar los valores de k en función de las θ para los que hay solución. En este caso θ es la variable dada por las condiciones de contorno. Si se obtienen los valores de k en función de las θ , como ya hemos visto, con ellos se puede llegar a los distintos autovalores en función del parámetro, que determinan las condiciones de contorno cuasiperiódicas. Vamos a definir su **función espectral** como:

$$h_{cp}(k) \equiv \cos(\theta) - \cos(kL) \quad (3.27)$$

Para resolver (3.26), se volverá a hacer uso del software **Wolfram Mathematica**, haciendo uso del comando **ContourPlot** según se explicó en el caso de las C.C. de Robin, sólo cambia la función espectral. Se toma $\theta = [0, \pi]$, ya que al aparecer esta en un coseno, es el único intervalo en que no se repite. Debido a la fórmula $\cos(-x) = \cos(x)$, los valores en el intervalo $\theta = [-\pi, 0]$ son triviales de obtener. Con respecto a la L , por simplificar los cálculos, vamos a tomar un intervalo de anchura igual a 1. El valor de k vendrá dado por una serie de estados excitados, al igual que en el caso de las C.C. de Robin. De esta manera, la representación de estos estados excitados se incluye en la figura 3. Como se ha dicho con anterioridad, esta k se corresponde con los momentos de la partícula libre.

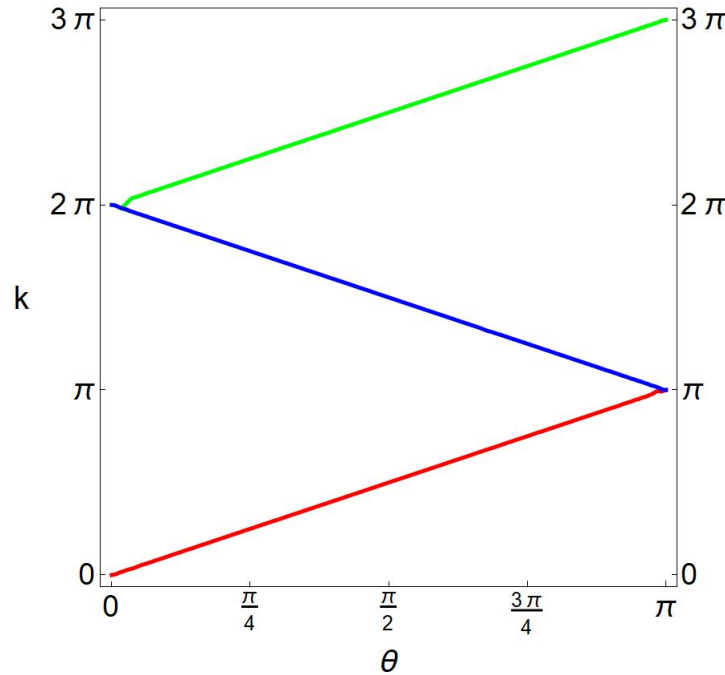


Figura 3: Gráfica representado los valores de los momentos k en sus diferentes estados excitados, en función de la variable θ de las condiciones de contorno cuasiperiódicas, obtenidos a partir de la ecuación espectral $h_{cp}(k) = 0$, para una partícula libre en el intervalo $[0, L = 1]$ de la recta real, definida por el Hamiltoniano autoadjunto (2.13) y las condiciones de contorno (3.24). En rojo se muestra el estado fundamental, en azul el primer estado excitado y en verde el segundo.

Usando el mismo desarrollo de las C.C. de Robin, también se puede sacar el valor de los autovalores E , que son proporcionales a k^2 , y son representados en la figura 4.

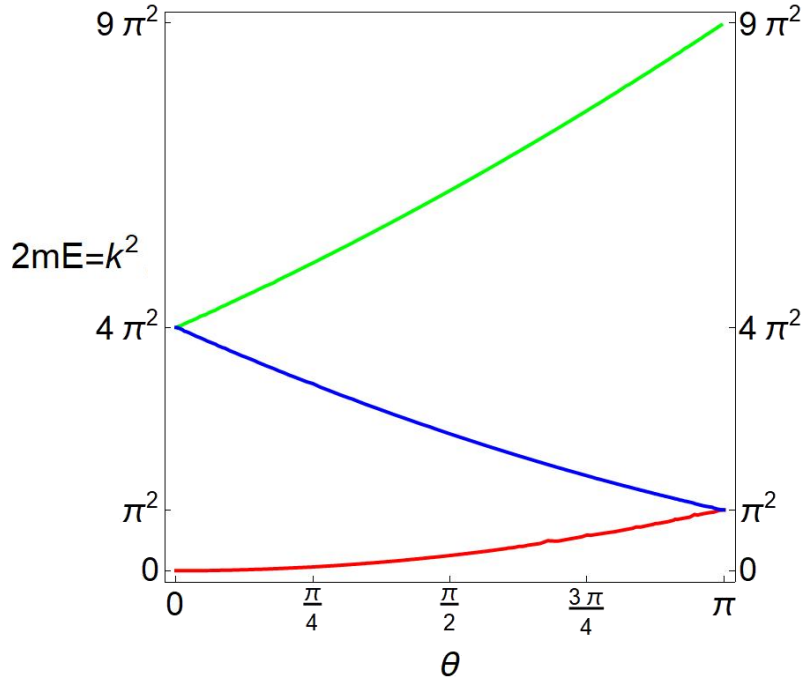


Figura 4: Gráfica representado los autovalores (o energías) del Hamiltoniano autoadjunto (2.13) en función de la variable θ de las condiciones de contorno cuasiperiódicas (3.24), obtenidos a partir de la ecuación espectral $h_{cp}(k) = 0$, para una partícula libre en el intervalo $[0, L = 1]$ de la recta real. En rojo se muestra el estado fundamental, en azul el primer estado excitado y en verde el segundo.

Esta realización de Hamiltoniano autoadjunto con C.C. cuasiperiódicas es muy relevante para la comprensión de algunos procesos físicos en que se dan estas mismas condiciones de contorno. En este apartado se van a mencionar dos de las más relevantes.

3.2.1. Condiciones de contorno Periódicas

Cuando se estudiaron las C.C. de Robin, se introdujeron otras C.C., las de Dirichlet y Neumann, que eran casos particulares de las de Robin, para unos valores concretos de su parámetro característico, el α . Algo similar ocurre con las C.C. cuasiperiódicas, estas tienen un caso particular que aparece al tomar $\theta = 0$: estas serán las condiciones de contorno (C.C.) *Periódicas*, que tienen la expresión:

$$\begin{cases} \psi(0) = \psi(L) \\ \psi'(0) = \psi'(L) \end{cases} \quad (3.28)$$

Siendo ψ estados de $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$. Estas son las condiciones más sencillas que nos podemos encontrar. Cuando se requiere que las autofunciones del Hamiltoniano sean *smooth* (diferenciable en cualquier sitio e infinitamente derivable), sólo es necesaria la primera de las dos condiciones para asegurar la periodicidad. Aun así, las funciones de cuadrado integrable no tienen por qué ser *smooth*, es necesario añadir la segunda ecuación sobre las derivadas.

Si nos fijamos en las ecuaciones de ambas condiciones de contorno, es fácil ver que las C.C. periódicas son un caso particular de las cuasiperiódicas, ya que si en las ecuaciones de (3.24) evaluamos $\theta = 0$, llegamos a las C.C. periódicas.

Es muy sencillo ver que las C.C. periódicas cumplen el objetivo de hacer que el Hamiltoniano de la partícula libre (2.4) sea autoadjunto. $\forall g, f$ tales que verifican las C.C. periódicas, se cumple la relación de (3.5), la sustitución es directa:

$$\begin{aligned} f^* g' - (f^*)' g \Big|_0^L &= \left[f^* g' - (f^*)' g \right]_L - \left[f^* g' - (f^*)' g \right]_0 \\ &= f^*(L)g'(L) - (f^*)'(L)g(L) - f^*(0)g'(0) + (f^*)'(0)g(0) \\ &= f^*(0)g'(0) - (f^*)'(0)g(0) - f^*(0)g'(0) + (f^*)'(0)g(0) = 0 \end{aligned}$$

En vez de resolver la ecuación matricial para encontrar la ecuación espectral de las C.C. periódicas, como anteriormente, se puede sustituir directamente $\theta = 0$ en la ecuación espectral de las C.C. cuasiperiódicas y el resultado será el mismo:

$$1 - \cos(kL) = 0 \quad (3.29)$$

Esta ecuación es de fácil resolución, y se llega a los valores del momento k :

$$\boxed{k_n = \frac{2\pi n}{L} \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.30)}$$

Las conclusiones que se pueden sacar de este resultado son que los momentos k tienen estados excitados, pero en este caso no dependen de ningún parámetro que caracteriza las C.C. A partir de los valores de k se pueden hallar los autovalores de \mathbf{H} considerando la ecuación (2.10). Hay que notar que el espaciado entre niveles k es el máximo que se puede encontrar:

$$\Delta k_n = k_{n+1} - k_n = 2\pi/L$$

Esto se observa en la gráfica 3, al fijarse únicamente en los valores de $k(\theta = 0)$.

Un concepto muy importante que surge en esta discusión es la **degeneración**. La degeneración es, por definición, el número de autofunciones linealmente independientes que se asocian a cada autovalor E_k o, lo que es lo mismo, a cada valor de k . Los autovalores del Hamiltoniano autoadjunto que cumplen las C.C. periódicas tiene *degeneración*=2, en contraposición con todas las vistas antes de esta, que tienen *degeneración*=1.

Las funciones propias del Hamiltoniano de la partícula libre son, en general, de la forma $\psi_k(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$. En el caso de las C.C. de Robin, cada valor de k produce una autofunción distinta, y por ser casos particulares, lo mismo ocurre para las C.C. de Dirichlet y Neumann. Lo mismo ocurre para las C.C. cuasiperiódicas. Como para cada momento k hay un sólo seno o coseno asociado, a cada autovalor le corresponde un único estado, es decir, tiene degeneración 1.

El caso de las C.C. periódicas es distinto, porque aquí ocurre un *cambio de topología*. Fijando la mirada en la ecuación (3.28), en ambos extremos del intervalo se tiene el mismo valor de la función y de su derivada, lo que indica que se puede considerar que ese estado es el mismo y ambos extremos están unidos, pasando de un intervalo de la recta real con un principio (0) y un final (L)

a un círculo cerrado de radio ($R = \frac{L}{2\pi}$). El concepto de cambio de topología se refiere a que hemos pasado de tener dos extremos a tener un sistema en el que no hay ningún extremo, es un continuo (círculo de perímetro L).

El requerimiento de periodicidad de estas condiciones de contorno conduce a que sólo se puedan usar funciones periódicas, y las funciones periódicas que conocemos son el seno y el coseno. Por tanto, para un valor de $k_n = 2\pi n/L$ se tendrán dos posibles funciones diferentes:

$$\sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right) \quad , \quad \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right)$$

Es decir, hay dos posibles autofunciones para ese autovalor k_n . Esto será cierto para cualquier combinación lineal de estas funciones. Así se ve que tiene degeneración 2.

Volviendo a la imagen del círculo, en principio tendría que dar igual hacia que lado se mueva la función (horario o antihorario), ya que al ser una partícula libre en el círculo las funciones tienen que ser periódicas, lo que se traduce en una función seno o coseno. Teniendo en cuenta que el coseno es simétrico y el seno antisimétrico en el intervalo, por quiralidad al pasarlo a un círculo se traduce en que una va en un sentido y otra en el otro.

La gráfica 3 permite visualizar esa degeneración. En ella están representados los valores de los momentos en función del parámetro θ propio de las C.C. cuasiperiódicas, que tienen degeneración 1, es decir, a cada valor de k para un determinado θ le corresponde una sola autofunción. Las C.C. periódicas se dan para $\theta = 0$. Cada estado excitado $k(\alpha)$, representados por las líneas de colores, tiende a un mismo punto que el estado excitado siguiente cuando θ tiende a cero. A ese punto le corresponderán dos autofunciones para el mismo autovalor, hay degeneración 2.

La degeneración 2 se ve gráficamente si nos fijamos en el primer estado excitado (línea azul) y el segundo estado excitado (línea verde) de las C.C. cuasiperiódicas: según se desplazan hacia la izquierda en el eje de las θ , ambas tienden hacia el primer estado excitado de las C.C. periódicas. El cero modo o estado fundamental (línea roja) es una excepción, es el único con degeneración 1:

$$k_{n=0} = \frac{2\pi n}{L} \Big|_{n=0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sin(k_n x) \Big|_{n=0} = 0 \quad , \quad \cos(k_n x) \Big|_{n=0} = 1$$

Para ese valor de k sólo prevalece la función coseno.

3.2.2. Teorema de Bloch

En Física del Estado Sólido, una de las formas de estudiar los electrones de un sólido consiste en el modelo de electrones libres o *modelo de Sommerfeld*. En él se modeliza el sólido metálico de acuerdo a las siguientes hipótesis:

- En el metal existen los denominados *electrones de conducción*, que se constituyen de todos los electrones de valencia del metal.
- Se supone que estos electrones se comportan como un gas de partículas libres en el seno de un potencial generado por los iones. Perdemos todos los efectos asociados a la presencia de una estructura periódica.

- Se desprecia la interacción entre electrones y se considera que los electrones se mueven de forma independiente en un potencial cuadrado, en el que los límites se corresponden a las dimensiones del cristal.
- En este modelo se asume que los electrones siguen la estadística de Fermi-Dirac.

En este modelo se consideran C.C. cíclicas o periódicas. Este modelo no es perfecto y no da cuenta de varios comportamientos experimentales. Aquí es donde surge la necesidad de tener en cuenta la *presencia de los iones*.

Una teoría exacta para un sistema de iones y electrones interactuantes es inherentemente mecánico cuántico. El Hamiltoniano del sistema incluirá términos de interacción entre ambos y entre sí mismos:

$$\mathbf{H}\psi\left(\{\vec{R}_I; \vec{r}_i\}\right) = E\psi\left(\{\vec{R}_I; \vec{r}_i\}\right)$$

Donde \mathbf{H} es el Hamiltoniano de la partícula en ese potencial, E su energía y ψ una autofunción. \vec{R}_I y \vec{r}_i se refieren a la posición de los iones y de los electrones respectivamente. La expresión completa de ese Hamiltoniano es:

$$\mathbf{H} = -\sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_{\vec{R}_I}^2 - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} + \sum_{I,J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|}$$

Donde M_I y m_e son la masa del ión y la del electrón respectivamente, y Z_I se refiere al número de cargas positivas que hay en el ión. De esta forma, los términos a la derecha de la igualdad son, por orden de aparición, la energía cinética de cada ión, la energía cinética de cada electrón, la energía de interacción entre dos electrones, la energía de interacción entre un ión y un electrón, y la energía de interacción entre dos iones.

Por la aproximación de Born-Oppenheimer se toma la masa del ión como demasiado grande en comparación con el electrón ($M_I/m_e \sim 10^3 - 10^5$). Así se elimina el término de la energía cinética de los iones, el primero a la derecha de la igualdad. Además, se puede aproximar a que los iones están en reposo, y se eliminaría el término del movimiento de un ión respecto a otro (el último a la derecha de la igualdad), quedando finalmente el Hamiltoniano del modelo de *electrones en un potencial periódico*:

$$\mathbf{H} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|}$$

Básicamente, con las C.C. periódicas ya se sabe cómo representar funciones con la periodicidad de la red [12]. Pero estas no bastan para una teoría física; hay que tener en cuenta excitaciones de la estructura, que destruyen la exacta simetría de traslación. Todas las excitaciones están recogidas por la ecuación de Schrödinger, y por el Hamiltoniano que se acaba de definir, que es invariante frente a las traslaciones de la red. Así, si $\mathcal{V}(\mathbf{r})$ es el potencial visto por un electrón en \mathbf{r} , entonces $\mathcal{V}(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = \mathcal{V}(\mathbf{r})$ para todo vector \mathbf{l} , siendo \mathbf{l} el vector de red. La función de onda del electrón, $\psi(\mathbf{r})$, ha de satisfacer una ecuación de Schrödinger:

$$\left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + \mathcal{V}(\mathbf{r}) - \mathcal{E}\right) \psi = 0$$

que es la misma si \mathbf{r} es sustituido por $\mathbf{r}+\mathbf{l}$ en el operador que actúa sobre ψ . Sean $(u_1, u_2, \dots, u_n, \dots)$ los desplazamientos de los átomos situados en $1, 2, \dots$. El Hamiltoniano contendrá estos operadores de tal manera que si se hace una traslación \mathbf{l} , es decir, poner u_{n+l} en todas las fórmulas, no se notará la diferencia. En otras palabras, todas las celdillas de la red son equivalentes e independientes. El resultado del *teorema de Bloch* es especialmente importante, y dice así [12]

Teorema 3.1 (Teorema de Bloch). *Para cualquier función de onda que satisface la ecuación de Schrödinger existe un vector \vec{k} tal que una traslación de vector de red \vec{l} equivale a multiplicar la función por un valor $e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}}$:*

$$\psi(\vec{r} + \vec{l}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}}\psi(\vec{r}) \quad (3.31)$$

Cada función de estado distinta puede tener un vector de onda \mathbf{k} distinto, pero todas han de satisfacer esta ecuación. Esta condición es muy restrictiva y se debe a la invariancia traslacional de la red. Este teorema se puede particularizar a una dimensión:

$$1D \Rightarrow \psi(x + l) = e^{ik\cdot l}\psi(x) \quad (3.32)$$

Al observar la expresión del teorema en 1D, se ve que está en consonancia con la expresión que hallamos para las C.C. cuasiperiódicas, siendo en este caso el parámetro θ que caracteriza las condiciones de contorno es el producto $k \cdot l$, del vector de onda k de la función de onda por un vector de red l .

Una demostración de este teorema se puede encontrar en [13], que consiste en escribir la función de onda del electrón en una combinación de ondas planas. Con esta forma de escribirla, se puede sustituir en la ecuación de Schrödinger y se encuentran un conjunto de ecuaciones que deben cumplir los coeficientes del desarrollo de la función de onda. Al ver cómo son estos coeficientes, se demuestra que la función de onda se puede escribir como una onda plana ($e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}}$) multiplicada por una función periódica ($\psi(\vec{r})$), por la periodicidad de la red. Así pues, el cuasimomento del cristal determina el parámetro de las C.C. cuasiperiódicas.

3.2.3. El efecto Aharonov–Bohm

En Electrodinámica Clásica y Mecánica cuántica aparece un efecto muy interesante y que merece la pena mencionar. Se considera una corteza cilíndrica hueca. Se asume que una partícula de carga e puede ser completamente confinada en el interior de la corteza cilíndrica con paredes rígidas. Se requiere que la función de onda desaparezca (sea absorbida) en las paredes interiores ($\rho = \rho_a$) y exteriores ($\rho = \rho_b$), así como en la parte de arriba y abajo.

Se va a considerar que la corteza cilíndrica contiene un campo magnético uniforme. Se puede tomar como que se inserta en el agujero en el medio de la corteza cilíndrica un solenoide muy largo, de tal manera que el campo magnético no atraviese la zona $\rho \geq \rho_a$, como se ve en la figura 5(b). Como el campo magnético no entra en el interior de la corteza esférica, que es donde está nuestro electrón, se puede llegar a pensar que el espectro de energías de la partícula en el interior es el mismo que si no estuviera, pero la Mecánica Cuántica dice lo contrario.

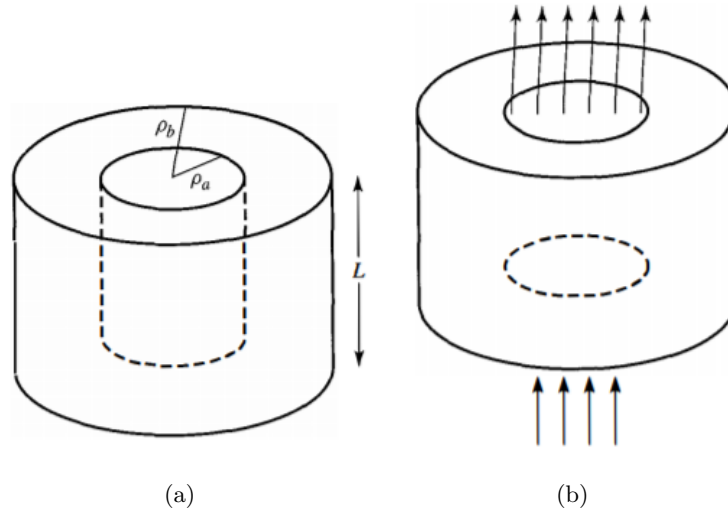


Figura 5: (a) Esquema de la corteza cilíndrica hueca (a) sin campo magnético atravesando su interior, (b) con un campo magnético uniforme atravesando su interior. [14]

Aunque el campo magnético no está en esa zona, el *potencial vector* \mathbf{A} sí que está, como se ve en la figura 5(b) [14]. El electrón sometido al potencial vector \mathbf{A} , que se considera de la forma:

$$\mathbf{A}_\mu \rightsquigarrow A = A_1 dx + A_2 dy$$

da vueltas en el interior de la corteza cilíndrica hueca, que clásicamente no se podría explicar.

Las condiciones de contorno cuasiperiódicas permiten modelar el efecto Aharonov–Bohm cuando el parámetro θ que caracteriza las condiciones de contorno es aproximadamente el flujo de campo magnético Φ que atraviesa el radio interno de la corteza cilíndrica. Esto hace que por cada vuelta completa que da el electrón en el interior de la corteza, se añade una fase en su función de onda. Sea $\mathbb{L} = 2\pi\rho$ la longitud de la circunferencia que recorre el electrón, sea ψ su función de onda:

$$\psi(x + \mathbb{L}) = e^{i\Phi} \psi(x) \quad (3.33)$$

donde Φ es una constante sin dimensiones proporcional al flujo magnético. Se ve que esta ecuación es de la forma de las C.C. periódicas. Se ha encontrado una manera de explicar varios efectos de la física, lo que nos da una idea de la utilidad de estos mecanismos.

3.3. Conclusiones de los ejemplos

Ahora que se ha llegado a este punto, conviene pararse y hacer una reflexión sobre todos los ejemplos que se han visto.

Una *realización de la partícula libre* se define como el conjunto de sus funciones de onda junto con sus autovalores. En esta sección se han estudiado casos en los que bajo ciertas condiciones de contorno sobre el intervalo, se cumple que el Hamiltoniano elegido es autoadjunto, dando lugar a una teoría bien definida para la partícula libre. En estos ejemplos el Hamiltoniano tradicional de la partícula libre es autoadjunto y se tiene por tanto un buen sistema cuántico.

El subespacio generado por la base de funciones que verifican unas condiciones de contorno dadas, tiene que ser *denso* en el espacio de funciones $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$ para que el Hamiltoniano sea autoadjunto. Que el subespacio sea denso, matemáticamente se refiere a que sea un subespacio maximal, de un orden menor al del espacio al que pertenezca. En este caso, el espacio de funciones $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$ tiene dimensión infinita, por lo que esos subespacios maximales también tendrán que ser de dimensión infinita.

Cada uno de los ejemplos vistos (C.C. de Dirichlet, Neumann, Robin, periódicas y cuasiperiódicas) cumplen dos características muy importantes:

1. Permite construir un subespacio de $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$, mediante unas condiciones de contorno, en el cual el hamiltoniano es autoadjunto.
2. Estos subespacios son de dimensión infinita dentro del espacio de funciones $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$.

Se puede concluir de esto que estos ejemplos son realizaciones no triviales de la partícula libre. Esto implica que para definir una partícula libre en un intervalo hay que construir subespacios de dimensión infinita en $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$, en los cuales el Hamiltoniano sea autoadjunto, y para eso necesitamos unas Condiciones de Contorno.

4. Teoría Global de Condiciones de Contorno Cuánticas en 1+1

Una vez estudiada la partícula libre en 1 + 1 dimensiones sobre la recta real, vamos a desarrollar una teoría rigurosa que permita responder a la pregunta “¿Qué es la partícula libre en el intervalo finito $[0, L]$?”. El Hamiltoniano cuántico que describe los estados de la partícula en esta teoría cuántica de campos viene dado por el *operador de Laplace* sobre la recta finita $[0, L]$, que denominaremos por \mathbf{L} [15]. Partiendo de lo conocido, proponemos como Hamiltoniano de la partícula libre en $M = [0, L]$ el operador de Laplace (tomando $\hbar = 1$):

$$\mathbf{L} = -\frac{1}{2m}\partial_x^2 \quad (4.1)$$

Por analogía con lo ya conocido, se puede inferir que ese operador actúa en el espacio de funciones $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C}) \equiv \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$, y por lo tanto los dominios de las diferentes extensiones autoadjuntas están en dicho espacio de Hilbert. Con un proceso análogo a los que ya hemos visto, se podrá llegar a un sistema que *no* verifica los axiomas tradicionales de la mecánica cuántica.

Recordando el segundo postulado de la mecánica cuántica [11], cualquier cantidad física medible viene descrita por un operador que es un observable, es decir autoadjunto. Ahora se procede a comprobar que *el operador \mathbf{L} no es autoadjunto*.

Si el espacio físico donde vive nuestra partícula libre cuántica es el intervalo finito $[0, L]$, entonces el operador (4.1) que hemos propuesto como Hamiltoniano libre con dominio $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$ debería ser autoadjunto para satisfacer los axiomas elementales de la mecánica cuántica. Sean $\phi_1(x), \phi_2(x) \in \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$ funciones cualesquiera, entonces usando la definición de la norma en $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$, la ecuación que nos relaciona las normas:

$$\langle \phi_1, \mathbf{L}\phi_2 \rangle - \langle \mathbf{L}\phi_1, \phi_2 \rangle = \frac{1}{2m} \left[\phi_2 \partial_x \phi_1^* - \phi_1^* \partial_x \phi_2 \right]_0^L \quad (4.2)$$

Esto demuestra que el operador \mathbf{L} operando sobre el dominio $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$ no es un operador autoadjunto: la parte derecha de la igualdad no se hace cero. Como el intervalo $[0, L]$ es finito, las funciones de $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$ no tienen porque anularse en $x = 0, L$.

El aspecto clave de este resultado es que la obstrucción que \mathbf{L} presenta a ser autoadjunto depende únicamente de los *valores de borde* de las funciones contenidas en el dominio sobre el que \mathbf{L} opera, es decir, $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$. Esto se relaciona con la corriente de probabilidad de la presencia de las partículas que se escapa a través de los bordes.

Para poder adquirir una comprensión profunda tanto física como matemática, la obstrucción a que \mathbf{L} sea autoadjunto:

$$\Sigma(\phi_1, \phi_2) = \langle \phi_1, \mathbf{L}\phi_2 \rangle - \langle \mathbf{L}\phi_1, \phi_2 \rangle = \frac{1}{2m} \left[\phi_2 \partial_x \phi_1^* - \phi_1^* \partial_x \phi_2 \right]_0^L$$

se debe escribir en términos de las cantidades adecuadas.

Sea $\psi \in \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$, entonces se definen los siguientes *vectores de borde*:

$$\Phi_{\pm}(\psi) = \begin{pmatrix} \psi(0) \pm i \partial_n \psi(0) \\ \psi(L) \pm i \partial_n \psi(L) \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Donde $\Phi_{\pm}(\psi) \in \mathbb{C}^2$, y siendo ∂_n la derivada normal en la dirección saliente al borde del intervalo M de la recta real. Se toma saliente por convenio. Es decir:

$$\begin{aligned} x = 0 & \Rightarrow \partial_n = -\partial_x \\ x = L & \Rightarrow \partial_n = +\partial_x \end{aligned}$$

Así, el vector de borde se puede escribir como:

$$\Phi_{\pm}(\psi) = \begin{pmatrix} \psi(0) \mp i \psi'(0) \\ \psi(L) \pm i \psi'(L) \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

El problema que se plantea ahora es conseguir escribir $\Sigma(\phi_1, \phi_2)$ en términos de $\Phi_{\pm}^{\dagger}(\phi_1)$ y $\Phi_{\pm}(\phi_2)$. Nótese que como ϕ_1 sólo aparece en Σ conjugado, Σ sólo debe depender de $\Phi_{\pm}^{\dagger}(\phi_1)$ y no del vector base sin conjugar.

Para empezar, se va a escribir qué forma tienen $\Phi_{\pm}^{\dagger}(\phi_1)$ y $\Phi_{\pm}(\phi_2)$:

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm}(\phi_1) &= \begin{pmatrix} \phi_1(0) \mp i \phi_1'(0) \\ \phi_1(L) \pm i \phi_1'(L) \end{pmatrix} \Rightarrow \Phi_{\pm}^{\dagger}(\phi_1) = (\phi_1^*(0) \pm i (\phi_1^*)'(0) \quad \phi_1^*(L) \mp i (\phi_1^*)'(L)) \\ \Phi_{\pm}(\phi_2) &= \begin{pmatrix} \phi_2(0) \mp i \phi_2'(0) \\ \phi_2(L) \pm i \phi_2'(L) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Donde equivalen las expresiones $\partial_x \phi_1 \equiv \phi_1'$ y $\partial_x \phi_2 \equiv \phi_2'$.

Si se desarrolla $\Sigma(\phi_1, \phi_2)$ de la misma forma que en (2.17):

$$\begin{aligned} \Sigma(\phi_1, \phi_2) &= \frac{1}{2m} \left[\phi_2 \partial_x \phi_1^* - \phi_1^* \partial_x \phi_2 \right]_0^L \\ &= \frac{1}{2m} \left[\phi_2(L) \partial_x \phi_1^*(L) - \phi_1^*(L) \partial_x \phi_2(L) - \phi_2(0) \partial_x \phi_1^*(0) + \phi_1^*(0) \partial_x \phi_2(0) \right] \\ &= \frac{1}{2m} \left[\phi_2(L) (\phi_1^*)'(L) - \phi_1^*(L) \phi_2'(L) - \phi_2(0) (\phi_1^*)'(0) + \phi_1^*(0) \phi_2'(0) \right] \end{aligned} \quad (4.5)$$

La forma de esta expresión se puede identificar con una suma de productos de vectores Φ_{\pm} y sus conjugados hermíticos. Así, se van a realizar las siguientes operaciones:

$$\begin{aligned} \Phi_{+}^{\dagger}(\phi_1) \cdot \Phi_{+}(\phi_2) &= (\phi_1^*(0) + i (\phi_1^*)'(0) \quad \phi_1^*(L) - i (\phi_1^*)'(L)) \cdot \begin{pmatrix} \phi_2(0) - i \phi_2'(0) \\ \phi_2(L) + i \phi_2'(L) \end{pmatrix} \\ &= \phi_1^*(0) \phi_2(0) - i \phi_1^*(0) \phi_2'(0) + i (\phi_1^*)'(0) \phi_2(0) + (\phi_1^*)'(0) \phi_2'(0) \\ &\quad + \phi_1^*(L) \phi_2(L) + i \phi_1^*(L) \phi_2'(L) - i (\phi_1^*)'(L) \phi_2(L) + (\phi_1^*)'(L) \phi_2'(L) \end{aligned}$$

Y:

$$\begin{aligned} \Phi_{-}^{\dagger}(\phi_1) \cdot \Phi_{-}(\phi_2) &= (\phi_1^*(0) - i (\phi_1^*)'(0) \quad \phi_1^*(L) + i (\phi_1^*)'(L)) \cdot \begin{pmatrix} \phi_2(0) + i \phi_2'(0) \\ \phi_2(L) - i \phi_2'(L) \end{pmatrix} \\ &= \phi_1^*(0) \phi_2(0) + i \phi_1^*(0) \phi_2'(0) - i (\phi_1^*)'(0) \phi_2(0) + (\phi_1^*)'(0) \phi_2'(0) \\ &\quad + \phi_1^*(L) \phi_2(L) - i \phi_1^*(L) \phi_2'(L) + i (\phi_1^*)'(L) \phi_2(L) + (\phi_1^*)'(L) \phi_2'(L) \end{aligned}$$

Observando ambas, aparecen los términos de $\Sigma(\phi_1, \phi_2)$ que nos interesan. Para eliminar los que no interesan, se prueba a restarlas, y estos se van:

$$\Phi_{-}^{\dagger}(\phi_1) \cdot \Phi_{-}(\phi_2) - \Phi_{+}^{\dagger}(\phi_1) \cdot \Phi_{+}(\phi_2) = i 2 \phi_1^*(0) \phi_2'(0) - i 2 (\phi_1^*)'(0) \phi_2(0) - i 2 \phi_1^*(L) \phi_2'(L) + i 2 (\phi_1^*)'(L) \phi_2(L)$$

Donde estos términos coinciden con los términos del desarrollo de $\Sigma(\phi_1, \phi_2)$ obtenidos en (4.5), salvo por factores generales. Así:

$$\boxed{\Sigma(\phi_1, \phi_2) = \frac{1}{2m} \frac{1}{2i} \left[\Phi_-^\dagger(\phi_1) \cdot \Phi_-(\phi_2) - \Phi_+^\dagger(\phi_1) \cdot \Phi_+(\phi_2) \right]} \quad (4.6)$$

Al escribir la obstrucción a que \mathbf{L} sea autoadjunto, $\Sigma(\phi_1, \phi_2)$, con esta expresión, se han logrado varios avances que nos van a ser útiles. Este $\Sigma(\phi_1, \phi_2)$ es una forma bilineal: a cada “estado” $\psi \in \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$ se le hace corresponder dos vectores en \mathbb{C}^2 , los $\Phi_{\pm}(\psi)$. Con la definición vista en (4.4), estos caracterizan los valores de borde del estado.

En la expresión obtenida para $\Sigma(\phi_1, \phi_2)$, aparece el producto escalar de dos vectores, de manera que se puede escribir como una forma cuadrática sobre \mathbb{C}^2 . Expresándolo así, será mucho más fácil encontrar los casos en que el operador \mathbf{L} autoadjunto, que como se ha visto aparecerán cuando $\Sigma(\phi_1, \phi_2)$ se anule.

La ventaja de usar los vectores $\Phi_{\pm}(\psi)$ frente al estado ψ es la manera en la que simplifica los cálculos a la hora de encontrar un operador autoadjunto, como se va a ver. Se fija $\phi_1 = \phi_2 = \psi$. Hay que asignar a cada elemento ψ de $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$ un número:

$$\tilde{\Sigma}(\psi) \propto \frac{1}{2} \left[\Phi_-^\dagger(\psi) \cdot \Phi_-(\psi) - \Phi_+^\dagger(\psi) \cdot \Phi_+(\psi) \right]$$

Dónde $\tilde{\Sigma}(\psi) \in \mathbb{C}$.

Para encontrar un operador \mathbf{L} autoadjunto, es necesario que este número sea cero. Eso sólo se va a conseguir si los vectores $\Phi_{\pm}(\psi)$ son isótropos respecto de la forma cuadrática Σ . Esto se traduce en que se puede pasar del vector Φ_- al Φ_+ a través de una matriz unitaria. Sea U una matriz unitaria 2×2 perteneciente al grupo de matrices unitarias $U(2)$, definido como:

$$U \in U(2) \quad \text{si} \quad U \in \mathbb{C}^{2 \times 2} \quad \text{y} \quad U^\dagger \cdot U = \mathbb{I}$$

Siendo \mathbb{I} la matriz identidad 2×2 [16]. Esto es lo mismo que decir que una matriz es unitaria si su adjunto es igual a su inversa.

- Para toda matriz unitaria $U \in U(2)$ y valores de borde Φ_{\pm} que verifican:

$$\boxed{\Phi_- = U\Phi_+} \quad (4.7)$$

Se tiene:

$$\Phi_-^\dagger \cdot \Phi_- = \Phi_+^\dagger U^\dagger \cdot U\Phi_+ = \Phi_+^\dagger \cdot \Phi_+ \quad \Rightarrow \quad \Sigma(\psi) = 0$$

Encontrándose así que el valor de $\tilde{\Sigma}(\psi)$ se hace cero, por lo que el operador será autoadjunto. Con este procedimiento, podemos describir un Hamiltoniano autoadjunto de la partícula libre en el intervalo sólo dando la expresión del operador junto con la matriz unitaria U correspondiente, que determina una condición de contorno. Es lo que vamos a ver en sucesivos apartados.

En previos apartados, se había definido la extensión autoadjunta de un operador Hamiltoniano de la partícula libre como dar un subespacio denso en $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)$, donde el Hamiltoniano sea autoadjunto, es decir, un Hamiltoniano junto con las condiciones de contorno que lo hacen autoadjunto. Con todo lo visto en este apartado, los autores M. Asorey, G. Marmo, y A. Ibort obtuvieron el *Teorema Asorey-Ibort-Marmo (AIM)*(ver [1]). En una dimensión, este sería:

Teorema 4.1 (Teorema AIM₁₊₁). *El conjunto de extensiones autoadjuntas del Hamiltoniano (4.1) de la partícula libre en el intervalo está en correspondencia 1 a 1 con el grupo de matrices unitarias $U(2)$. Además las condiciones de contorno que caracteriza el dominio (subespacio de \mathcal{L}^2 dónde en Hamiltoniano es autoadjunto) viene dado por la ecuación (4.7).*

La demostración de este teorema se encuentra en la publicación de estos autores, [1].

Ahora conviene introducir un concepto que va a ser relevante para este trabajo, la extensión autoadjunta. sabemos que para construir una teoría bien definida para la partícula libre en el intervalo el operador Hamiltoniano tiene que ser autoadjunto, pero como hemos visto,

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

no es autoadjunto en $[0, L]$, porque aparece un flujo de probabilidad no nulo a través del borde. Ahora bien, el operador Hamiltoniano sí admite infinitas *extensiones autoadjuntas* en $[0, L]$, que están en correspondencia 1 a 1 con las matrices unitarias U : cada matriz U determina una extensión autoadjunta del Hamiltoniano. Dicho de otra forma, el dominio de los estados cuánticos que hacen que ese flujo de probabilidad de borde se anule y que permiten caracterizar la extensión autoadjunta del operador \mathbf{H} en $[0, L]$ viene dado por todos los estados de $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2([0, L])$ tal que se cumple la igualdad (4.7), siendo U una matriz unitaria.

Al operador Hamiltoniano original que no es autoadjunto en el intervalo hay que añadirle esas condiciones de borde para obtener una extensión autoadjunta del Hamiltoniano original. Añadiendo esas condiciones, el flujo de probabilidad se anula, por lo que el *Hamiltoniano junto con las condiciones de borde* es una extensión autoadjunta, y la teoría de la partícula libre ahora sí estaría bien definida en el intervalo. Se podría definir de manera más “formal” de la siguiente manera:

Definición 1 (Extensión autoadjunta). *Sea \mathbf{O} un operador en un espacio de Hilbert \mathcal{H} , tal que \mathbf{O} en \mathcal{H} no es autoadjunto, pero sí simétrico en un cierto subespacio $\mathcal{V} \in \mathcal{H}$ no denso (“muy pequeño”). Entonces, una extensión autoadjunta de \mathbf{O} en \mathcal{H} consiste en dar un subespacio \mathcal{W} , que contiene al subespacio \mathcal{V} siempre, denso en \mathcal{H} (subespacio “grande”) en el cual \mathbf{O} es un operador autoadjunto. El teorema AIM es el que nos permite construir estos subespacios \mathcal{W} . Así, cada extensión autoadjunta consta de dos cosas:*

1. El operador \mathbf{O}
2. El subespacio denso donde actúa, que es \mathcal{W} .

El problema ahora es, dado un operador de los dichos arriba, ¿cuántas extensiones autoadjuntas se pueden construir? En nuestro caso, infinitas. Para ver una definición *matemáticamente* formal de lo que es una extensión autoadjunta se recomienda consultar el capítulo X del libro [6], pero por su complejidad no queda aquí recogido.

También se puede entender una extensión autoadjunta desde un punto de vista físico [17]. Dado el operador Hamiltoniano de la partícula libre (2.4), este ya se ha visto que *no* es autoadjunto cuando se toma como su dominio las funciones de cuadrado integrable en el intervalo. Sin embargo, el operador *sí* que es simétrico cuando opera sobre las funciones diferenciables con soporte compacto en el interior del intervalo $[0, L]$. Por el teorema de Von Neumann (ver [6]), se puede demostrar que este operador admite un número infinito no numerable de extensiones autoadjuntas. Cada una de estas extensiones tienen como significado físico: “el espacio funciones de onda (estados) de la partícula cuyo Hamiltoniano es (2.13)”. Así, cada extensión autoadjunta de (2.13) nos da un espacio de estados sobre el cual dicho operador es autoadjunto y por tanto Hamiltoniano, según los postulados. Por lo tanto, puede en cierto modo entenderse que cada extensión autoadjunta es una realización de la partícula libre cuántica en el intervalo finito $[0, L]$.

4.1. Ejemplos

En la sección 3 se observaron ciertos ejemplos de extensiones autoadjuntas, en las que el Hamiltoniano de la partícula libre era autoadjunto bajo ciertas C.C. del intervalo. Allí las C.C. venían dadas en forma de ecuaciones que relacionan los valores de la función de onda en ambos extremos del intervalo. Haciendo uso del teorema AIM en una dimensión, podemos relacionar esas extensiones autoadjuntas con una matriz del grupo $U(2)$. Ese es el propósito de este apartado.

Para encontrar la matriz unitaria de borde U , se sustituyen las C.C. correspondientes en la ecuación (4.7). Se va a tomar:

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Así, la ecuación, para una función ϕ perteneciente al dominio \mathcal{D}_U correspondiente:

$$\begin{pmatrix} \phi(0) + i\phi'(0) \\ \phi(L) - i\phi'(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \phi(0) - i\phi'(0) \\ \phi(L) + i\phi'(L) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

- **C.C. de Dirichlet.** La forma de las condiciones de contorno de Dirichlet era, para una función $\psi \in \mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$:

$$\begin{cases} \psi(0) = 0 \\ \psi(L) = 0 \end{cases}$$

Sustituyendo estas en la ecuación matricial (4.9):

$$\begin{pmatrix} \psi'(0) \\ -\psi'(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\psi'(0) \\ \psi'(L) \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \psi'(0) = -u_{11}\psi'(0) + u_{12}\psi'(L) \\ \psi'(L) = u_{21}\psi'(0) - u_{22}\psi'(L) \end{cases}$$

Por unitariedad, la C.C. de Dirichlet se obtiene cuando U_D vale:

$$U_D = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\mathbb{I} \quad (4.10)$$

- **C.C. de Neumann.** La forma de las condiciones de contorno de Neumann era, para una función $\psi \in \mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$:

$$\begin{cases} \psi'(0) = 0 \\ \psi'(L) = 0 \end{cases}$$

Sustituyendo estas en la ecuación matricial (4.9):

$$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi(L) \end{pmatrix} \Rightarrow U_N = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{I} \quad (4.11)$$

- **C.C. de Robin.** La forma de las condiciones de contorno de Robin para el caso particular que se estudió en la sección 3 era, para una función $\psi \in \mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$:

$$\begin{cases} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \psi'(0) - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \psi(0) = 0 \\ \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \psi'(L) + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \psi(L) = 0 \end{cases}$$

Con $\alpha \in [0, \pi]$.

Se puede despejar $\psi(0), \psi(L)$ en función de $\psi'(0), \psi'(L)$, como se hizo en las ecuaciones (3.6) y (3.8):

$$\begin{aligned} \psi(0) &= \psi'(0) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ \psi(L) &= -\psi'(L) \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{aligned}$$

Sustituyendo estas en la ecuación matricial (4.9):

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi'(0) \left[i + \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] \\ -\psi'(L) \left[i + \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\psi'(0) \left[i - \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] \\ \psi'(L) \left[i - \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} \psi'(0) \\ -\psi'(L) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\psi'(0) \\ \psi'(L) \end{pmatrix} \cdot \frac{i - \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{i + \cot\left(\frac{\alpha}{2}\right)} \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que $\cot(x) = \frac{1}{\tan(x)} = \frac{\cos(x)}{\sin(x)}$ y que $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$, se ve que la relación entre las funciones es igual a la de las C.C. de Dirichlet, pero multiplicada por un factor, que despejándolo es $-e^{i\alpha}$. Así, el operador unitario que caracteriza esta familia de C.C. de Robin viene dado por:

$$U_R = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix} = e^{i\alpha} \mathbb{I} \quad (4.12)$$

Darse cuenta de que $U_R(\alpha = 0) = \mathbb{I} = U_N$ y $U_R(\alpha = \pi) = -\mathbb{I} = U_D$. Esto cuadra con los resultados vistos en apartados anteriores, ya que cuando $\alpha = 0$, las C.C. de Robin se convierten en las C.C. de Neumann, y para $\alpha = \pi$ pasan al caso de las C.C. de Dirichlet.

- **C.C. Periódicas.** La forma de las condiciones de contorno periódicas era, para una función $\psi \in \mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$:

$$\begin{cases} \psi(0) = \psi(L) \\ \psi'(0) = \psi'(L) \end{cases}$$

Una manera equivalente de escribir estas dos ecuaciones independientes es:

$$\begin{cases} \psi(0) + i\psi'(0) = \psi(L) + i\psi'(L) \\ \psi(L) - i\psi'(L) = \psi(0) - i\psi'(0) \end{cases}$$

Siguiendo la notación de Φ_{\pm} , se pueden escribir las C.C. periódicas en la forma:

$$\begin{pmatrix} \psi(0) + i\psi'(0) \\ \psi(L) - i\psi'(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi(0) - i\psi'(0) \\ \psi(L) + i\psi'(L) \end{pmatrix} \Rightarrow \Phi_{-}(\psi) = \sigma_1 \cdot \Phi_{+}(\psi)$$

Donde σ_1 es la correspondiente matriz de Pauli. Por lo tanto, comparando con la ecuación (4.7), se ve que la matriz unitaria que caracteriza las C.C. periódicas viene dada por:

$$U_p = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_1 \quad (4.13)$$

- **C.C. Cuasiperiódicas.** La forma de las condiciones de contorno cuasiperiódicas era, para una función $\psi \in \mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$:

$$\begin{cases} \psi(0) = e^{i\theta}\psi(L) \\ \psi'(0) = e^{i\theta}\psi'(L) \end{cases}$$

Una manera equivalente de escribir estas dos ecuaciones independientes es:

$$\begin{cases} \psi(0) + i\psi'(0) = e^{i\theta}(\psi(L) + i\psi'(L)) \\ \psi(L) - i\psi'(L) = e^{-i\theta}(\psi(0) - i\psi'(0)) \end{cases}$$

Siguiendo la notación de Φ_{\pm} , se pueden escribir las C.C. cuasiperiódicas en la forma:

$$\begin{pmatrix} \psi(0) + i\psi'(0) \\ \psi(L) - i\psi'(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi(0) - i\psi'(0) \\ \psi(L) + i\psi'(L) \end{pmatrix} \Rightarrow U_{cp} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Como comprobación, se puede ver que estas matrices son en efecto unitarias. Tomando el caso de las C.C. cuasiperiódicas (U_{cp}), se comprueba que es realmente unitaria:

$$\begin{aligned} U_{cp}^{\dagger} \cdot U_{cp} &= \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix} = U_{cp}^2 = \mathbb{I} \\ U_{cp} \cdot U_{cp}^{\dagger} &= \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix} = U_{cp}^2 = \mathbb{I} \end{aligned}$$

Se comprueba que sí es unitaria, $U_{cp} \in U(2)$.

5. Cálculo de la función espectral general

Recapitulando sobre lo visto hasta ahora, se han seguido una serie de ejemplos en los que para el Hamiltoniano de la partícula libre en el intervalo se toman determinadas condiciones de contorno (C.C.) que lo hacen ser autoadjunto. Posteriormente, se ha llegado a encontrar que el conjunto de extensiones autoadjuntas de ese Hamiltoniano está en correspondencia 1 a 1 con una matriz unitaria del grupo $U(2)$. En la resolución de los casos concretos de C.C., para encontrar los autovalores y autofunciones del Hamiltoniano se tenía que llegar a una función espectral $h(k)$ que relacionaba parámetros de las C.C. con los momentos k de la partícula. En este apartado se va a tratar de encontrar una función espectral general $h_U(k)$, para una matriz unitaria general U .

En un caso caso general en el que tenemos una matriz unitaria $U \in U(2)$ y los valores de los vectores de borde, vamos a partir de la relación (4.7) y así sacar una relación que nos asegure que el Hamiltoniano sea autoadjunto. Sea una función $\psi \in \mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$:

$$\Phi_-(\psi) = U \cdot \Phi_+(\psi)$$

Por tanto, el *dominio* de funciones que definen la extensión autoadjunta del Hamiltoniano de la partícula libre (2.4) está definido por las funciones:

$$\mathcal{D}_U = \{\psi \in \mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C}) / \Phi_- = U \cdot \Phi_+\} \quad (5.1)$$

Como $[0, L]$ es un intervalo compacto de la recta real, es espectro de \mathbf{H} es discreto. Estos valores propios son reales, pero tenemos que encontrar restricciones que nos digan que son positivos también, por ser la partícula libre. Para encontrar las restricciones que impone esta condición en las matrices unitarias es conveniente encontrar una función espectral cuyos ceros coincidan con los valores propios del Hamiltoniano.

Para hallar la función espectral, primero hay que sustituir los valores de las funciones de borde, ya visto en (4.4):

$$\Phi_{\pm}(\psi) = \begin{pmatrix} \psi(0) \mp i \psi'(0) \\ \psi(L) \pm i \psi'(L) \end{pmatrix}$$

Y ya es conocida la forma de las funciones propias del Hamiltoniano: $\psi_k(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$. Evaluando las funciones de borde con este valor:

$$\begin{aligned} \psi(0) &= A + B & \psi(L) &= A e^{ikL} + B e^{-ikL} \\ \psi(0) &= ik(A - B) & \psi(L) &= ik(A e^{ikL} - B e^{-ikL}) \end{aligned}$$

Agrupando los factores que van con los coeficientes A y B :

$$\Phi_{\pm}(\psi) = \begin{pmatrix} A(1 \pm k) + B(1 \mp k) \\ A e^{ikL}(1 \mp k) + B e^{-ikL}(1 \pm k) \end{pmatrix}$$

Reescribiendo esto de una forma más elegante:

$$\Phi_{\pm}(\psi) = \begin{pmatrix} (1 \pm k) & (1 \mp k) \\ e^{ikL}(1 \mp k) & e^{-ikL}(1 \pm k) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Donde se ha obtenido una matriz a la que vamos a llamar:

$$M_{\pm}(k) = \begin{pmatrix} (1 \pm k) & (1 \mp k) \\ e^{ikL}(1 \mp k) & e^{-ikL}(1 \pm k) \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

Así, sustituyendo la nueva expresión de Φ_{\pm} dentro de la ecuación (4.7), queda una ecuación dependiente de la nueva matriz M_{\pm} :

$$M_{-}(k) \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = U \cdot M_{+}(k) \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \Rightarrow \boxed{[M_{-}(k) - U \cdot M_{+}(k)] \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0} \quad (5.3)$$

Hemos llegado a un sistema que, para que tenga solución no trivial, es necesario imponer que:

$$\det [M_{-} - U \cdot M_{+}] = 0 \quad (5.4)$$

Por lo tanto, los valores de k vienen dados por los ceros de la *función espectral general*, definida por:

$$h_U(k) \equiv \det [M_{-}(k) - U \cdot M_{+}(k)] \quad (5.5)$$

Expandiendo ese determinante, se obtiene la función espectral en forma explícita:

$$\begin{aligned} h_U(k) &= \det \left[\begin{pmatrix} (1-k) & (1+k) \\ e^{ikL}(1+k) & e^{-ikL}(1-k) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} (1+k) & (1-k) \\ e^{ikL}(1-k) & e^{-ikL}(1+k) \end{pmatrix} \right] \\ &= \det \left[\begin{pmatrix} (1-u_{12}e^{ikL})(1-k) - u_{11}(1+k) & (1-u_{12}e^{-ikL})(1+k) - u_{11}(1-k) \\ (e^{ikL} - u_{21})(1+k) - u_{22}e^{ikL}(1-k) & (e^{-ikL} - u_{21})(1-k) - u_{22}e^{-ikL}(1+k) \end{pmatrix} \right] \end{aligned}$$

Haciendo las operaciones y aplicando identidades trigonométricas, llegamos a:

$$\boxed{h_U(k) = i [(k^2 + 1)(\det(U) + 1) + (k^2 - 1)\text{tr}(U)] \sin(kL) - 2k(u_{12} + u_{21}) - 2k(\det(U) - 1) \cos(kL)} \quad (5.6)$$

Siendo:

$$\det(U) = u_{11} \cdot u_{22} - u_{12} \cdot u_{21} \quad \text{tr}(U) = u_{11} + u_{22}$$

Los valores permitidos de k vienen dados por las raíces de la ecuación trascendente $h_U(k) = 0$. No es posible resolver esta ecuación para cualquier matriz unitaria U , pero sin embargo, se puede extraer gran cantidad de información de esta función espectral.

5.1. Parametrización de la matriz unitaria

Como se sabe, el espacio de condiciones de contorno permitidas para el sistema cuántico de una partícula viene dado por algunas matrices unitarias $U \in U(2)$. Para poder estudiar en más profundidad la función espectral general $h_U(k)$ que se acaba de calcular, se va a escribir la matriz unitaria $U \in U(2)$ en la parametrización usual, en términos de *matrices de Pauli*: toda matriz $U \in U(2)$ se escribe de la forma:

$$U(\alpha, \beta, \theta, \gamma) = e^{i\alpha}(\cos(\beta)\mathbb{I} + i \sin(\beta)\mathbf{n}(\theta, \gamma) \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (5.7)$$

Donde:

$$\alpha \in [0, \pi] \quad , \quad \beta \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$$

Vamos a identificar el resto de componentes que parametrizan la matriz unitaria. Para empezar, \mathbb{I} es la matriz unidad 2×2 ; luego aparece σ el vector formado por las tres matrices de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

El \mathbf{n} es un vector unitario sobre la esfera S^2 :

$$\mathbf{n}(\theta, \gamma) = (\sin(\theta) \cos(\gamma), \sin(\theta) \sin(\gamma), \cos(\theta)); \quad \theta \in [0, \pi], \gamma \in [0, 2\pi] \quad (5.9)$$

Ahora que ya se tiene la parametrización explicada, se pueden empezar a sustituir elementos en la función espectral general (5.6). Utilizando esta parametrización, el determinante y la traza de $U(\alpha, \beta, \theta, \gamma)$ vienen dados por:

$$\det(U) = e^{2i\alpha} \quad \text{tr}(U) = 2e^{i\alpha} \cos(\beta)$$

La suma de los elementos de la anti-diagonal es:

$$u_{12} + u_{21} = 2ie^{i\alpha} \cos(\gamma) \sin(\beta) \sin(\theta)$$

Ahora, sustituyendo todo de nuevo en la expresión de la función espectral general (5.6), y así nos queda en términos de las coordenadas de la parametrización de U , es decir $(\alpha, \beta, \theta, \gamma)$:

$$h_U(k; \alpha, \beta, \theta, \gamma) = 2ie^{i\alpha} [(k^2 - 1) \cos(\beta) + (k^2 + 1) \cos(\alpha)] \sin(kL) - 2k \sin(\alpha) \cos(kL) - 2k \cos(\gamma) \sin(\theta) \sin(\beta) \quad (5.10)$$

5.2. Estados ligados de la partícula libre

Se sabe que la energía E de la partícula libre se relaciona con los momentos k de la forma que vimos en (2.10):

$$E_k = \frac{k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad k \propto \sqrt{E_k}$$

Se ha partido de que en la partícula libre no hay estados ligados, de energía negativa, pero si los hubiese, esto haría que el valor de k fuese un número imaginario. Esto físicamente corresponde a una inestabilidad de la teoría asociada a la producción de pares partícula-antipartícula. En definitiva, aquellas condiciones de contorno que den lugar a estados ligados en el problema de mecánica cuántica ordinaria asociado a la teoría de campos, no deben ser admisibles. Por ello, el espacio de condiciones de contorno permitidas para la teoría de campos, no coincide con el de las condiciones de contorno del problema de mecánica cuántica ordinaria asociado. No obstante las condiciones permitidas en la teoría de campos sí que estarán contenidas dentro de las permitidas para el problema de mecánica cuántica asociado.

Los estados ligados por tanto irán asociados a los valores de k puramente imaginarios. Esto conduce a considerar solamente las raíces imaginarias en la función espectral, es decir tomar las raíces de la ecuación trascendente $h_U(ik) = 0$, siendo $h_U(ik)$:

$$h_U(ik) = -2ik(u_{12} + u_{21}) - 2ik(\det(U) - 1) \cosh(kL) + [(k^2 - 1)(\det(U) + 1) + (k^2 + 1)\text{tr}(U)] \sinh(kL) \quad (5.11)$$

La aparición de estos estados ligados lleva a una discusión muy interesante que se basa en los puntos siguientes:

- En general, dada una condición de contorno definida por el operador $U \in U(2)$, la extensión autoadjunta dada por el operador $\partial_x^2|_U$ puede tener estados de energía negativa.
- De todas las posibles condiciones de contorno, las que más pueden ser asimiladas a la partícula libre serán aquellas que *no* tienen autovalores negativos para cualquier valor de ancho del intervalo L , es decir, extensiones autoadjuntas no negativas.

La condición clave para que una extensión autoadjunta no tenga estados de energía negativa, es que el Hamiltoniano asociado sea definido positivo, i.e.:

$$\forall \psi \in \mathcal{D}_U(\mathbf{H}), \quad \boxed{\langle \psi, \mathbf{H}\psi \rangle \geq 0} \quad (5.12)$$

Donde el Hamiltoniano es el que habíamos visto para la partícula libre:

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Esta expresión se puede desarrollar para verla más sencilla. Con la definición de la norma en $\mathcal{L}^2([0, L], \mathbb{C})$:

$$\langle \psi, \mathbf{H}\psi \rangle = \left\langle \psi, -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi \right\rangle = -\frac{1}{2m} \int_0^L dx \psi^* \frac{d^2}{dx^2} \psi$$

Usando la integración por partes:

$$\langle \psi, \mathbf{H}\psi \rangle = -\frac{1}{2m} \left[\psi^* \frac{d}{dx} \psi \Big|_0^L - \int_0^L dx \frac{d}{dx} \psi^* \frac{d}{dx} \psi \right] = \frac{1}{2m} \left[-\psi^* \frac{d\psi}{dx} \Big|_0^L + \left\langle \frac{d\psi}{dx}, \frac{d\psi}{dx} \right\rangle \right] \geq 0 \quad (5.13)$$

Se puede observar que en esta última igualdad, el primer sumando lleva la dependencia en la condición de contorno (el operador unitario U) y los valores de borde, y el segundo sumando lleva el comportamiento en el interior del espacio. Ambos sumandos son definido positivos, pero el signo menos relativo entre ambos, hace que puedan existir extensiones autoadjuntas con estados de energía negativa. Al ser el segundo sumando a la derecha de la igualdad positivo, y como está sumando, al final hace que la relación se reduzca a:

$$\frac{-1}{2m} \psi^* \frac{d\psi}{dx} \Big|_0^L \geq 0 \quad (5.14)$$

Podemos cambiar de forma la condición de contorno (4.7):

$$\Phi_-(\psi) = U \cdot \Phi_+(\psi) \Rightarrow \begin{pmatrix} \psi(0) + i\psi'(0) \\ \psi(L) - i\psi'(L) \end{pmatrix} = U \cdot \begin{pmatrix} \psi(0) - i\psi'(0) \\ \psi(L) + i\psi'(L) \end{pmatrix}$$

Para poder estudiar la condición (5.14), interesa separar las funciones de sus derivadas:

$$\Phi_-(\psi) = U \cdot \Phi_+(\psi) \Rightarrow (\mathbb{I} - U) \cdot \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi(L) \end{pmatrix} = i(U + \mathbb{I}) \cdot \begin{pmatrix} -\psi'(0) \\ \psi'(L) \end{pmatrix}$$

En esta ecuación se pueden identificar otro tipo de vectores de borde, a los que se va denominar φ y $\dot{\varphi}$ son:

$$\varphi \equiv \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi(L) \end{pmatrix}, \quad \dot{\varphi} \equiv \begin{pmatrix} -\psi'(0) \\ \psi'(L) \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

Así, se ha encontrado una nueva expresión para la condición de contorno:

$$\Phi_-(\psi) = U \cdot \Phi_+(\psi) \Rightarrow \boxed{(\mathbb{I} - U) \cdot \varphi = i(\mathbb{I} + U) \cdot \dot{\varphi}} \quad (5.16)$$

Para que el Hamiltoniano sea no negativo se debe cumplir la desigualdad (5.14), que con esta nueva nomenclatura pasa a ser:

$$\begin{aligned} \frac{-1}{2m} \psi^* \frac{d\psi}{dx} \Big|_0^L &= \frac{-1}{2m} [\psi^*(L)\psi'(L) - \psi^*(0)\psi'(0)] = \frac{-1}{2m} [\psi^*(L)\psi'(L) + \psi^*(0)(-\psi'(0))] \\ &= \frac{-1}{2m} \varphi^\dagger \cdot \dot{\varphi} \end{aligned}$$

A partir de la relación (5.16), se puede despejar el vector de borde $\dot{\varphi}$ y sustituirlo:

$$\frac{-1}{2m} \psi^* \frac{d\psi}{dx} \Big|_0^L = \frac{-1}{2m} \varphi^\dagger \cdot \dot{\varphi} = \frac{1}{2m} \left[\varphi^\dagger \cdot i \frac{\mathbb{I} - U}{\mathbb{I} + U} \varphi \right] \geq 0 \quad (5.17)$$

Esto se puede traducir en decir que para que una extensión autoadjunta no tenga estados de energía negativa, la siguiente matriz no debe tener autovalores negativos:

$$i \frac{\mathbb{I} - U}{\mathbb{I} + U} \geq 0 \quad (5.18)$$

Se tiene que las condiciones de contorno de la teoría de campos vienen dadas por el siguiente lema:

Lema 5.1. *Las condiciones de contorno de la teoría de campos se hallan en correspondencia biunívoca con las condiciones de contorno para la teoría de campos en el límite de gran L .*

La demostración de este lema es muy sencilla. Si una condición de contorno da lugar a una teoría de campos consistente para todo valor de L , en particular lo sería para el caso de L grande. Así pues hay que ver, que si una condición de contorno es consistente en el límite de gran L , en efecto lo es para todo valor de L . Basta para ello tomar (5.14) y darse cuenta de que si en el límite de gran L la teoría es consistente, quiere decir que el operador:

$$i \frac{\mathbb{I} - U}{\mathbb{I} + U}$$

es definido positivo para todos los vectores de valores de borde en el límite de gran L , ya que en el límite de gran L el término con $\frac{d\psi}{dx}$ tiende a cero.

Ahora, dado que dichos vectores son grados de libertad independientes en el borde (se despejaron las derivadas en términos de los valores de borde para obtener (5.14)), significa, que en efecto dicho operador es definido positivo. Como U no depende explícitamente del tamaño del borde (la dependencia de las condiciones de contorno con el borde se halla codificada en la estructura del espacio de condiciones de contorno), se puede decir que el operador anterior es definido positivo para todo L , y por tanto se satisfará la condición de que el Hamiltoniano sea definido positivo para todo L .

Por lo tanto bastará estudiar el límite de gran L para hallar las condiciones de contorno que dan lugar a teorías de campos consistentes para todo valor de L , con lo que queda demostrado el lema.

Como se comentó antes, de todas las posibles condiciones de contorno, las que más pueden ser asimiladas a la partícula libre serán aquellas que no tienen autovalores negativos para cualquier valor de ancho del intervalo L . Es decir, $h_U(ik)$ no puede tener ceros reales y positivos en k , en el límite de L grande (por el lema anterior). Las contribuciones de los ceros imaginarios puros dan frecuencias negativas. En primer lugar hay que tomar el límite de gran L en la función espectral $h_U(ik)$. Tanto $\sinh(kL)$ como $\cosh(kL)$ se comportan como e^{kL} en el límite de gran L , y por lo tanto estos términos son dominantes respecto a los demás. Así pues, en el límite de gran L la función espectral toma la forma:

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{h_U(ik)}{e^{kL}} &= h_U^\infty(ik) = -2ik(\det(U) - 1) + (k^2 - 1)(\det(U) + 1) + (k^2 + 1)\text{tr}(U) \\ &= (k - i)^2 \det(U) + (k + i)(k - i)\text{tr}(U) + (k + i)^2 \end{aligned}$$

Depende sólo de invariantes algebraicos de la matriz unitaria U (determinante y traza). Sea su *polinomio característico*:

$$c_U(x) = x^2 - x\text{tr}(U) + \det(U) \quad (5.19)$$

Se puede reescribir en la forma:

$$h_U^\infty(ik) = \frac{1}{2}(k - i)^2 c_U\left(-\frac{k + i}{k - i}\right)$$

Ahora, la condición para que no tenga raíces en k reales y positivas, si a los valores propios de U se les denomina λ_j , $j = 1, 2$, es que la *transformada de Cayley* de los valores propios de U (k_j , $j = 1, 2$) no sea real y positiva, i. e.:

$$k_j = i \frac{\lambda_j - 1}{\lambda_j + 1} \notin \mathbb{R}^+ \quad (5.20)$$

Escribiendo el polinomio característico en función de la parametrización de U :

$$c_U(x) = x^2 - 2xe^{i\alpha} \cos(\beta) + e^{2i\alpha}$$

Las raíces de U vienen dadas por:

$$\lambda_1 = e^{i(\alpha+\beta)} \quad \lambda_2 = e^{i(\alpha-\beta)}$$

Así, los valores de la transformada de Cayley:

$$k_1 = -\tan\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) \quad k_2 = -\tan\left(\frac{\alpha - \beta}{2}\right)$$

Así, la condición que buscábamos nos dice que se tiene que cumplir:

$$\tan\left(\frac{\alpha \pm \beta}{2}\right) > 0 \quad (5.21)$$

Que es lo mismo que decir:

$$\frac{\alpha \pm \beta}{2} \in \left(\bigcup_{n=0}^{\infty} \left[n\pi, (2n+1)\frac{\pi}{2} \right] \right) \cup \left(\bigcup_{m=1}^{\infty} \left[-m\pi, -(2m-1)\frac{\pi}{2} \right] \right) \quad (5.22)$$

Ahora bien, por otra parte, la parametrización tomada para $U(2)$, exige que $\alpha \in [0, \pi]$, $\beta \in [-\pi/2, \pi/2]$, con lo que finalmente el espacio \mathcal{M}_F de condiciones de contorno no negativas viene dado por:

$$\mathcal{M}_F \equiv \{U(\alpha, \beta, \mathbf{n}) \in U(2) \mid 0 \leq \alpha \pm \beta \leq \pi\} \quad (5.23)$$

Se pueden representar en una figura en función de los parámetros α y β las zonas en ese plano en las que *no* hay estados ligados para ninguna longitud L del intervalo, como se ve en la figura 6. Es decir, en la zona sombreada de la figura se marca las C.C. o matrices U para los que la partícula libre no tiene estados ligados:

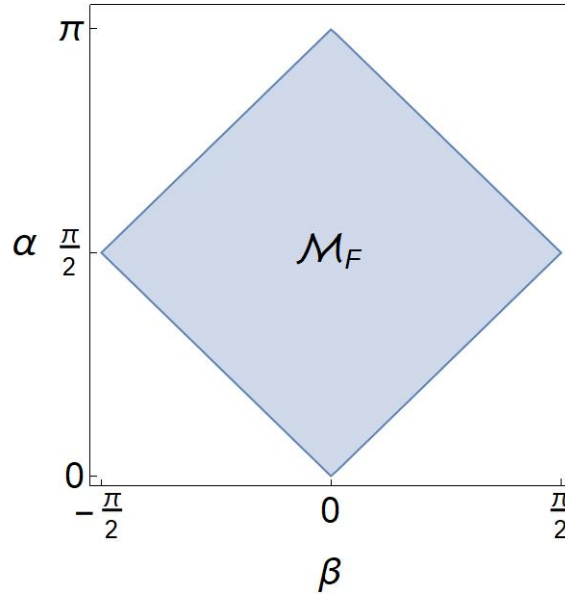


Figura 6: Espacio de condiciones de contorno que producen que no haya estados ligados de la energía como autovalor del Hamiltoniano autoadjunto (2.13) para una partícula libre en el intervalo $[0, L]$ de la recta real, para todos los valores posibles de L (zona sombreada); sobre el plano α, β , para el tramo de valores $0 \leq \alpha \pm \beta \leq \pi$

Se recalca que la zona sombreada de la gráfica indica las condiciones de contorno para las que no hay estados ligados para ninguna longitud L del intervalo, pero para una L concreta, puede haber condiciones de contorno sin estados ligados fuera de ese rombo.

Obsérvese que como $U(\alpha, \beta, \mathbf{n}) = U(\alpha, -\beta, -\mathbf{n})$ las condiciones de contorno descritas por los parámetros $(\alpha, \beta, \mathbf{n})$ y $(\alpha, -\beta, -\mathbf{n})$ son en realidad las mismas.

Es interesante localizar en el rombo las condiciones de contorno estudiadas en los ejemplos del apartado 3, que eran casos en los que no se obtenían estados ligados. Ya se habían obtenido sus matrices unitarias correspondientes:

- *C.C. de Dirichlet:* $U_D = -\mathbb{I} \Rightarrow \alpha = \pi, \beta = 0$, por lo que se localizan en la esquina superior del rombo.
- *C.C. de Neumann:* $U_N = \mathbb{I} \Rightarrow \alpha = \beta = 0$, por lo que se localizan en la esquina inferior del rombo.
- *C.C. de Robin:* $U_R = e^{i\alpha}\mathbb{I} \Rightarrow \beta = 0$. Hay que darse cuenta de que las C.C. de Dirichlet y Neumann son casos particulares de las C.C. de Robin, para $\alpha = \pi$ y $\alpha = 0$ respectivamente. Esto se traduce sobre el rombo como que la representación de las C.C. de Robin es una línea recta vertical que une las esquinas superior e inferior del rombo ($\beta = 0, \alpha \in (0, \pi)$). Así se puede ver gráficamente que las condiciones de Dirichlet y Neumann son casos particulares de las C.C. de Robin.
- *C.C. periódicas:* $U_p = \sigma_1 \Rightarrow \alpha = \pi/2, \beta = \pm\pi/2$. Las C.C. periódicas se pueden localizar en las esquinas derecha e izquierda del rombo, y hay dos porque, como ya se ha visto, las C.C. periódicas poseen degeneración 2.

El otro parámetro de la matriz unitaria U que no estamos teniendo en cuenta aquí es el vector \mathbf{n} unitario sobre la esfera. Sobre la gráfica 6 se podría tomar como si cada punto del rombo, que corresponde a una matriz unitaria o condiciones de contorno determinadas, fuese el centro de una esfera de radio módulo de \mathbf{n} . El valor de este “radio” varía de izquierda a derecha en el eje de las β , de tal manera que para la esquina izquierda, este es máximo: ($\beta = -\pi/2, \mathbf{n} = n_1 = 1$), y para la esquina derecha es de ($\beta = \pi/2, \mathbf{n} = n_1 = -1$). Ambos puntos se corresponde a C.C. periódicas, y es la situación es que esta esfera tendrá mayor radio, porque aunque el vector tenga sentido -1 , su módulo es igual a cuando tiene dirección 1. Cuando nos desplazamos hacia el centro del rombo este radio disminuye, has que en la recta de las C.C. de Robin (que incluye las de Dirichlet y Neumann) esa esfera se vuelve un punto, su radio es cero: ($\beta = 0, \mathbf{n} = 0$).

5.2.1. Extensiones autoadjuntas negativas: estados ligados

De la gráfica 6 hemos dicho que las condiciones de contorno que se encuentran dentro del rombo sombreado se corresponden con extensiones autoadjuntas sin estados ligados para todas las longitudes de intervalo posible. En este apartado, vamos a tomar un punto aleatorio fuera de este rombo para tratar de representar con la ecuación espectral $h_U(k) = 0$ sus autovalores de energía negativa.

Para ello vamos a tomar dos situaciones, representadas en la figura 7, una en la que fijemos un valor de α (recta roja) y dejemos el parámetro β como variable, y para ese recta se debería encontrar algún juego de condiciones de contorno (una matriz unitaria U) verse algún estado ligado. El otro caso, es realizar el mismo proceso pero para un valor de β (recta verde) y dejemos el parámetro α como variable.

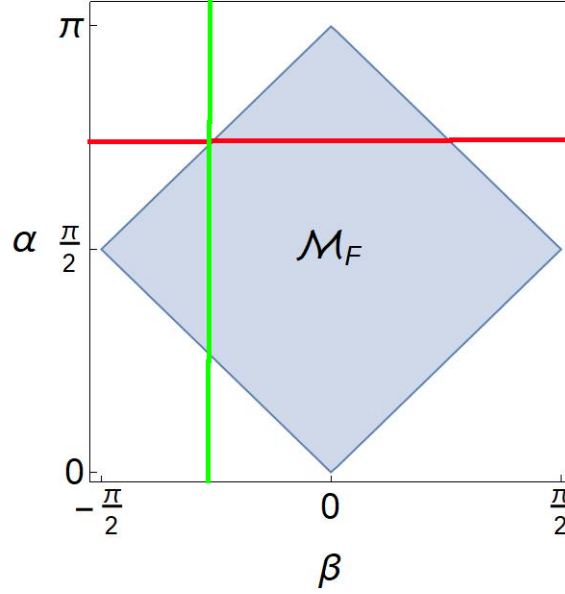


Figura 7: Espacio de condiciones de contorno que producen que no haya estados ligados de la energía como autovalor del Hamiltoniano autoadjunto (2.13) para una partícula libre en el intervalo $[0, L]$ de la recta real, para todos los valores posibles de L (zona sombreada); sobre el plano α, β , para el tramo de valores $0 \leq \alpha \pm \beta \leq \pi$. La recta roja representa un valor de $\alpha = 3\pi/4$ constante, y la recta verde representa un valor de $\beta = -\pi/4$ constante.

- Recta con $\alpha = \frac{3\pi}{4}$ constante

La matriz unitaria U que va a representar estas condiciones de contorno viene parametrizada por $U = U(n_1^{(0)}, \beta, \alpha_0)$, con:

$$\alpha_0 = \frac{3\pi}{4} \quad \beta \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right] \quad -1 < n_1^{(0)} < 1$$

Hemos tomando que el vector unitario de la esfera $\mathbf{n} = (n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, n_3^{(0)}) = (n_1^{(0)}, 0, 0)$ sin perder generalidad. Las únicas zonas en las que hay seguridad de no encontrar estados ligados es en la parte de la recta que va en el interior del rombo. Además, se va a particularizar para el intervalo con $L = 1$.

Llevando estos resultados a la fórmula de la función espectral para valores imaginarios $h_U(ik)$ pero en términos de los parámetros de U :

$$\begin{aligned} h_U(ik; \alpha, \beta, \theta, \gamma) &= 2ie^{i\alpha} [((-k^2 - 1) \cos(\beta) + (-k^2 + 1) \cos(\alpha)) \sin(ikL) - 2ik \sin(\alpha) \cos(ikL) \\ &\quad - 2ik \cos(\gamma) \sin(\theta) \sin(\beta)] \\ &= 2ie^{i\frac{3\pi}{4}} \left[- \left((k^2 + 1) \cos(\beta) + (-k^2 + 1) \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \sin(ik) - \sqrt{2}ik \cos(ik) - 2ik n_1^{(0)} \sin(\beta) \right] \end{aligned}$$

Esta ecuación podemos tratar de resolverla con el software **Mathematica**. El procedimiento es sencillo, se va a seguir el mismo que se usó para sacar la gráfica de las energías de las C.C. de Robin (ver anexo 7.2), en el que representamos la energía en este caso respecto del parámetro β .

Una diferencia que aparece en este caso es que en la función espectral aparecen dos parámetros libres, β y n_1 : para poder hacer la representación de $E_n(\beta)$, hay que fijar el valor de n_1 . Se toma $n_1 = 0$ para simplificar los cálculos. Así, podemos llegar a observar los estados de energía positiva junto con el estado ligado de energía negativa, representados en la figura 8.

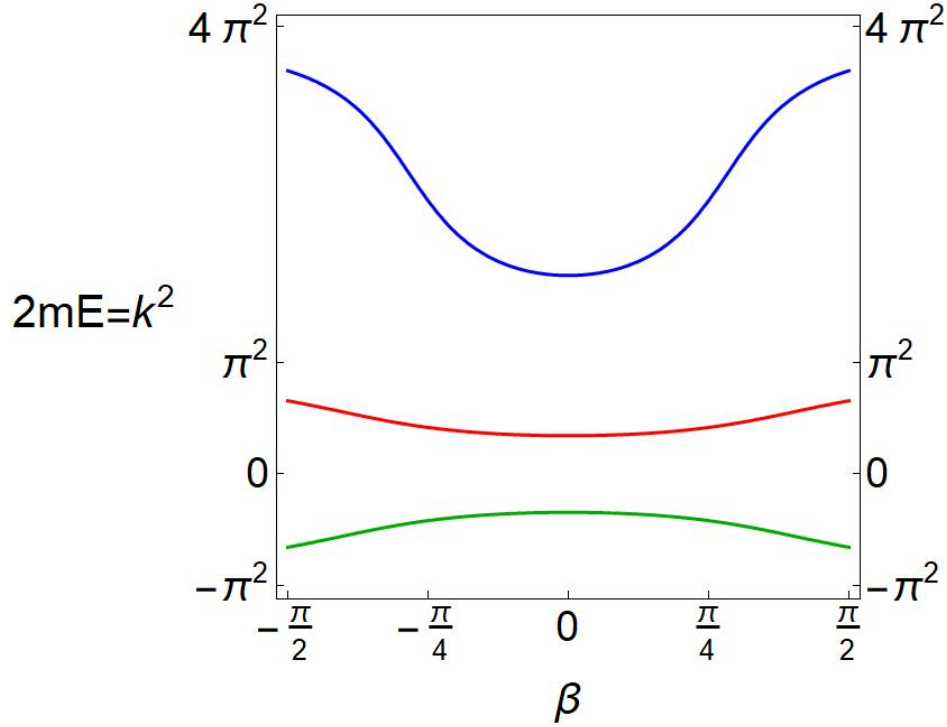


Figura 8: Gráfica representado los autovalores (o energías) del Hamiltoniano autoadjunto (2.13) en función de la variable $\beta \in [-\pi/2, \pi/2]$ de las condiciones de contorno dadas por $U = U(n_1^{(0)} = 0, \beta, \alpha_0 = 3\pi/4)$, obtenidos a partir de la ecuación espectral $h_U(ik; \alpha, \beta, n_1) = 0$, para una partícula libre en el intervalo $[0, L = 1]$ de la recta real. En rojo se muestra el estado fundamental, en azul el primer estado excitado y en verde el estado ligado de energía negativa.

- Recta con $\beta = -\frac{\pi}{4}$ contante

La matriz unitaria U que va a representar estas condiciones de contorno viene parametrizada por $U = U(n_1^{(0)}, \beta_0, \alpha)$, con:

$$\alpha \in [0, \pi] \quad \beta = -\frac{\pi}{4} \quad -1 < n_1^{(0)} < 1$$

Se va a particularizar para el intervalo con $L = 1$ y para el vector unitario de la esfera $\mathbf{n} = (n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, n_3^{(0)}) = (0, 0, 0)$. Llevando estos resultados a la fórmula de la función espectral para valores imaginarios $h_U(ik)$ pero en términos de los parámetros de U :

$$\begin{aligned} h_U(ik; \alpha, \beta, \theta, \gamma) &= 2ie^{i\alpha} [((-k^2 - 1) \cos(\beta) + (-k^2 + 1) \cos(\alpha)) \sin(ikL) - 2ik \sin(\alpha) \cos(ikL) \\ &\quad - 2ik \cos(\gamma) \sin(\theta) \sin(\beta)] \\ &= 2ie^{i\alpha} \left[\left((-k^2 + 1) \frac{1}{\sqrt{2}} + (-k^2 + 1) \cos(\alpha) \right) \sin(ik) - 2ik \sin(\alpha) \cos(ik) + \sqrt{2} ik n_1^{(0)} \right] \end{aligned}$$

Para resolver esta ecuación, se sigue el mismo procedimiento que para el valor de α fijo, y se llega a la gráfica 9.

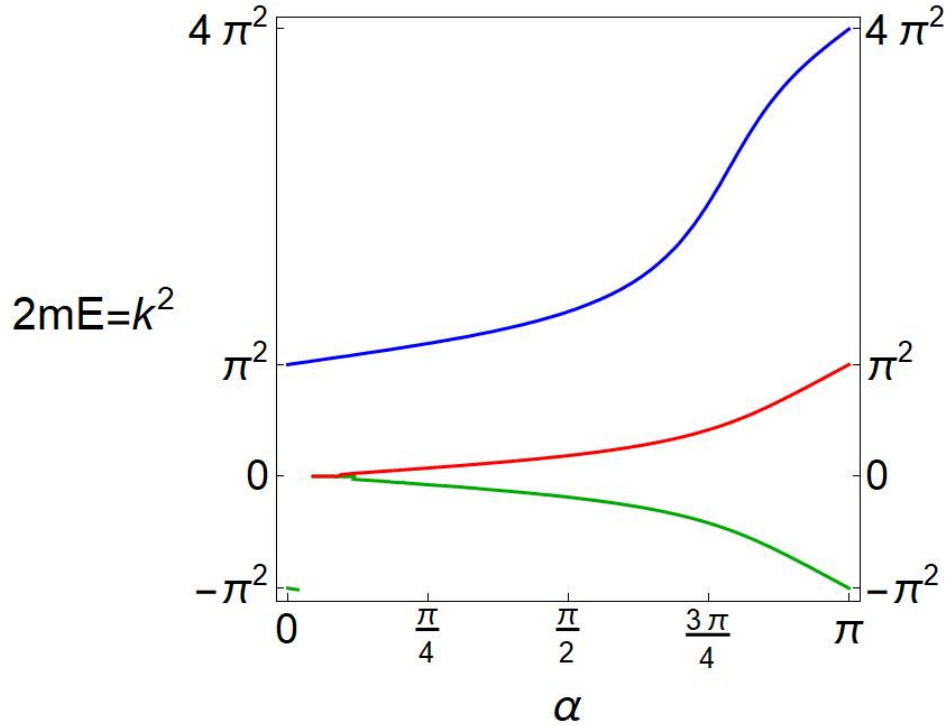


Figura 9: Gráfica representado los autovalores (o energías) del Hamiltoniano autoadjunto (2.13) en función de la variable $\alpha \in [0, \pi]$ de las condiciones de contorno dadas por $U = U(n_1^{(0)} = 0, \beta_0 = -\pi/4, \alpha)$, obtenidos a partir de la ecuación espectral $h_U(ik; \alpha, \beta, n_1) = 0$, para una partícula libre en el intervalo $[0, L = 1]$ de la recta real. En rojo se muestra el estado fundamental, en azul el primer estado excitado y en verde el estado ligado de energía negativa.

Es interesante observar como en el estado ligado que hemos encontrado para el valor de $\alpha = cte.$, la gráfica de $E_n(\beta)$ tiene una forma senoidal respecto a β , y esa misma forma se observa en la gráfica de $E_n(\alpha)$ para $\beta = cte.$

5.3. Cero modos de extensiones autoadjuntas

En esta sección se va a estudiar la estructura de cero modos de extensiones autoadjuntas contenidas en \mathcal{M}_F (ver ecuación (5.23)). La estructura de cero modo en extensiones autoadjuntas, por definición, consiste en que el autovalor del Hamiltoniano es igual a cero. Así, sustituyendo en la ecuación en autovalores del Hamiltoniano dará lugar a la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_0(x) = 0 \quad (5.24)$$

Cuya solución general será:

$$\psi_0(x) = a + bx \quad (5.25)$$

donde a y b son números constantes complejos.

En estos cero modos hay dos cosas a tener en cuenta:

- Cuando la extensión autoadjunta está definida sobre toda la recta real, la única solución posible para un $\psi_0(x)$ con norma \mathcal{L}^2 finita, viene dada por $a = b = 0$. Por tanto, cuando la extensión autoadjunta está definida sobre toda la recta real *no* hay cero modos.
- Por otro lado, cuando la extensión autoadjunta está definida sobre un intervalo finito $[0, L]$, debido a la longitud finita del intervalo la solución general $\psi_0(x)$ siempre tiene norma \mathcal{L}^2 finita. Por tanto, cuando la extensión autoadjunta está definida sobre un intervalo finito, existe la posibilidad de encontrar cero modos constantes y lineales.

Dada una extensión autoadjunta $\in \mathcal{M}_F$, para ver si admite cero modos de la forma general (5.25), se debe imponer sobre $\psi_0(x)$ las correspondiente condiciones de contorno (5.16). Primero se van a definir las matrices de borde φ_{\pm} para $\psi_0(x)$:

$$\varphi_{\pm}(\psi_0(x)) \equiv \begin{pmatrix} a \mp ib \\ a + b(L \pm i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \mp i \\ 1 & (L \pm i) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Introduciendo esta en la en la condición de contorno (5.16), se obtiene el sistema lineal:

$$\left[\begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & L - i \end{pmatrix} - U \cdot \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & L + i \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

Este sistema son las condiciones de contorno de los cero modos. Le vamos a dar nombre a la matriz del sistema lineal:

$$D_U = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & L - i \end{pmatrix} - U \cdot \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & L + i \end{pmatrix} \quad (5.26)$$

5.3.1. La extensión de Von Neumann-Krein

En el estudio de los cero modos, es interesante observar un caso particular: la extensión de Von Neumann-Krein. Esta es la extensión autoadjunta mínima de las no negativas, y se caracteriza por tener dos cero modos en lugar de uno. Sus condiciones de contorno se encuentran fuera de \mathcal{M}_F , es decir, en la gráfica 6 se encontrarían fuera de la zona sombreada del rombo.

Guiados por [18, 19, 20], la extensión VNK del operador T sobre el intervalo finito $[0, L]$ se caracteriza como la *única* extensión autoadjunta con un número máximo de cero modos, 2: un cero modo constante y un cero modo lineal. Por tanto, la condición que caracteriza de manera única la extensión VNK es:

$$D_U = 0 \Rightarrow U_{VNK} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & L - i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & L + i \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{L + 2i} \begin{pmatrix} L & 2i \\ 2i & L \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

Es directo comprobar que U_{VNK} es una matriz unitaria, y por tanto define una extensión autoadjunta del Hamiltoniano sobre el intervalo. Lo que es interesante para ver y con lo que hay que quedarse de la extensión VNK es que el parámetro que caracteriza sus condiciones de contorno es el L mismo, que a la vez sirve para definir la anchura del intervalo de la recta real en el que se mueve la partícula libre, $[0, L]$. Entonces cuando se varíe el tamaño del intervalo, las condiciones de contorno sobre sus extremos también irán variando.

Interesa ver qué forma tendrá la distribución de energías para este caso. La presencia de dos cero modos nos indica que seguramente sean formas interesantes. La función espectral h_{VKN} no podrá ser usada directamente, por lo mismo que ocurría en el caso de C.C. de Robin: los cero modos impiden ver con claridad el resto de autovalores al resolver la ecuación $h_{VKN} = 0$, por lo que deberá ir dividida por un factor de k . Directamente de la referencia [15], se toma la expresión de la función espectral que permitirá obtener los autovalores aparte de los cero modos:

$$f_{VKN} \equiv \frac{h_{VKN}}{2ik^5 e^{i\alpha_{VKN}}} = \frac{\sin(\beta_{VKN})}{k^4} (kL \sin(kL) + 2 \cos(kL) - 2) \quad (5.28)$$

Los parámetros $\{\alpha_{VKN}, \beta_{VKN}, \mathbf{n}_{VKN}\}$ que caracterizan la extensión VNK vienen dados por (5.7). Como U_{VKN} es una matriz simétrica y los elementos diagonales son iguales, se debe requerir $n_2 = n_3 = 0$, por lo que se puede asumir sin pérdida de generalidad que $\mathbf{n}_{VKN} = (1, 0, 0)$. Teniendo esto en cuenta y comparando U_{VKN} con (5.7), se obtienen los valores:

$$\beta_{VKN} = \arctan\left(\frac{2}{L}\right) \quad \alpha_{VKN} = -\beta_{VKN} = -\arctan\left(\frac{2}{L}\right)$$

Así pues, ya se puede sustituir β_{VKN} en la expresión de f_{VKN} . Para resolver la ecuación espectral $f_{VKN} = 0$ se hará uso del software **Wolfram Mathematica**. El proceso de resolución es el mismo que se ha usado para las C.C. de Robin o las C.C. cuasiperiódicas (ver anexo 7.1). La representación de los momentos k dependiendo del ancho del intervalo, que a la vez es la variable de las C.C., va a ser de la forma representada en la figura 10:

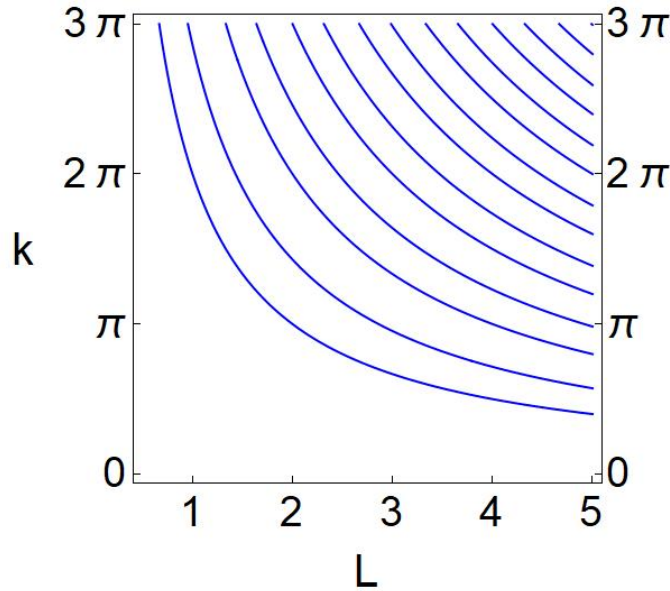


Figura 10: Gráfica representado los valores de los momentos k en sus diferentes estados excitados, en función del parámetro L de las condiciones de contorno de la extensión de Von Neumann-Krein, obtenidos a partir de la ecuación espectral $f_{VKN}(k) = 0$, para una partícula libre en el intervalo $[0, L]$, siendo el parámetro L a la vez la anchura del intervalo de la recta real, definida por el Hamiltoniano autoadjunto (2.13).

En esta gráfica se ven los estados excitados $k_n(L)$, y se observan dos asíntotas. Cuando $L \rightarrow 0$ se observa que los momentos tienden a infinito, cosa que no es posible. La explicación puede venir por el *principio de incertidumbre de Heisenberg* [11], que postula que si conocemos de forma muy precisa la posición de la partícula, no podremos conocer de forma tan precisa su velocidad y viceversa:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h \quad (5.29)$$

siendo Δp es la incertidumbre en conocer el momento de la partícula (momento igual a masa por velocidad), Δx es la incertidumbre en conocer la posición de la partícula y h es la *constante de Planck* ($h = 6,63 \cdot 10^{-34} J \cdot s$). Eso explica que si se reduce el ancho del intervalo a un punto, su momento no se puede determinar.

La otra asíntota $L \rightarrow \infty$ hace que los momentos tiendan a cero para el intervalo infinito, lo que tiene sentido si pensamos en lo repartida que estaría la partícula en esa situación.

Se va a probar a repetir el proceso, utilizando una variable sin dimensiones en vez del momento k . Se define la variable $x = kL$. Es evidente que las soluciones para x van a ser *independientes de* L , por lo tanto los valores de los momentos dependen de L de la siguiente manera: $k \propto 1/L$. Así, representando la variable adimensional x en función de la anchura del intervalo L surge la figura 11.

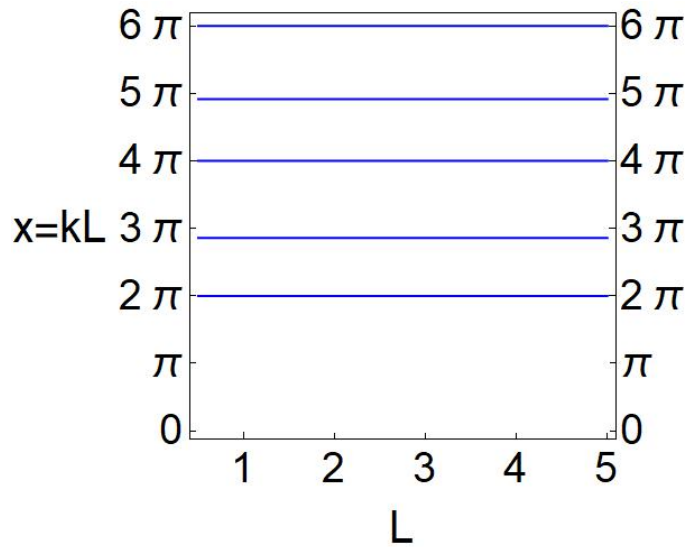


Figura 11: Gráfica representado los valores de la variable adimensional $x = kL$ en sus diferentes estados excitados, siendo k los momentos de la partícula libre, en función del parámetro L de las condiciones de contorno de la extensión de Von Neumann-Krein, obtenidos a partir de la ecuación espectral $f_{VKN}(k) = 0$, para una partícula libre en el intervalo $[0, L]$, siendo el parámetro L a la vez la anchura del intervalo de la recta real, definida por el Hamiltoniano autoadjunto (2.13).

De esta gráfica se pueden interpretar varias cosas interesantes. Para empezar, el estado fundamental está degenerado, por ser el cero modo con degeneración 2. Entonces, el estado fundamental iría con $x = 0$. Los valores representados en la gráfica 11 son los valores excitados. El primero de estos estados excitados tiene un GAP de 2π respecto del estado fundamental. Para el resto de estado excitados, ese GAP no se mantiene constante: por tanto, el espectro no es equiespaciado. Examinando la figura 11 más de cerca, se puede ver que los momentos k de los estados numerados con número impar ocurren cuando $x = 2n\pi, n = 1, 2, \dots$

6. Conclusiones

A lo largo de este trabajo se han seguido una serie de pasos que nos han llevado a comprender cómo una partícula libre confinada en un intervalo finito $[0, L]$ puede ser descrita a través de la mecánica cuántica, y cómo las condiciones de contorno que rigen el flujo de probabilidad a través del borde influyen en ésta. La partícula libre en la recta real es bien conocida por su expresión de Hamiltoniano, que es autoadjunto indicando que es un observable en mecánica cuántica. Tomando es caso de la partícula libre en el intervalo, se han encontrado impedimentos a que esté bien definida, siendo estos que no se puede encontrar un Hamiltoniano autoadjunto; lo que se necesita para arreglarlo es definir de una manera más precisa los espacios de estados, que es donde surge la necesidad de imponer unas condiciones de contorno. Sólo bajo determinadas condiciones, el Hamiltoniano se hará autoadjunto.

La clave es darse cuenta de que el sistema “partícula libre” no es único, sino que hay una serie de condiciones de contorno que hacen que la extensión sea o no autoadjunta, que son las que hacen que el sistema esté bien definido. En la sección 3 se han estudiado los casos más relevantes, algunos con análogo clásico, como era el caso de las C.C. de Dirichlet y Neumann, y otros sin análogo clásico, como en las C.C. cuasiperiódicas, en las que no habría sido posible dar cuenta del efecto Aharonov-Bohm sin la explicación cuántica de la relación entre campos. En otros casos, la explicación del comportamiento de determinadas condiciones de contorno viene determinada por un cambio de topología; ese es el caso de las C.C. periódicas, en que el paso de intervalo de la recta a un círculo nos permite ver que los autovalores de la partícula libre tienen degeneración 2.

Unos de los grandes avances obtenidos en este trabajo ha sido conseguir una teoría global que nos sirva para describir las condiciones de contorno, ya que así se ha logrado poder estudiar todos los casos en que la partícula libre sí está bien definida. Por medio del teorema AIM en una dimensión, se ha conseguido llegar a relacionar el conjunto de extensiones autoadjuntas del Hamiltoniano con el grupo de matrices unitarias $U(2)$. Esto sirve para facilitar el trabajar con las condiciones de contorno y así llegar a una expresión de la función espectral general, que nos sirva para encontrar los momentos y energías de la partícula libre sin tener que llegar manualmente a través de la expresión conocida de unas condiciones de contorno. La importancia de esto llega hasta a que podemos encontrar una fórmula con la cual sacar condiciones de contorno que ya hagan autoadjunto al Hamiltoniano.

Se ha partido de que en la partícula libre no hay estados ligados, al menos tal y como la definimos clásicamente. Aún así, hemos llegado a ver que en algunas extensiones autoadjuntas sí que aparecen estados de energía negativa. Físicamente corresponde a una inestabilidad de la teoría asociada a la producción de pares partícula-antipartícula. En definitiva, aquellas condiciones de contorno que den lugar a estados ligados en el problema de mecánica cuántica ordinaria asociado a la teoría de campos, no deben ser admisibles. Por ello, el espacio de condiciones de contorno permitidas para la teoría de campos, no coincide con el de las condiciones de contorno del problema de mecánica cuántica ordinaria asociado. No obstante las condiciones permitidas en la teoría de campos sí que estarán contenidas dentro de las permitidas para el problema de mecánica cuántica asociado. Esto enlaza con la teoría cuántica de campos.

Las condiciones de contorno no negativas para cualquier L , permiten promocionar el Hamiltoniano de la partícula libre no relativista, al operador que genera los estados de una partícula de una teoría de campos cuánticos escalares. Así interpretado, permite interpretar los bordes del intervalo como placas plano paralelas, siendo el campo cuántico una *colectividad macrocanónica* de partículas que

no interaccionan entre si. En esta situación es bien conocido que se produce el *efecto Casimir*, por el cual las fluctuaciones cuánticas del vacío del campo cuántico dan lugar a una fuerza entre placas que puede ser medida, y es además relevante a escalas del nanómetro. En esta situación, la energía de interacción generada por el campo cuántico entre placas modeladas por una extensión autoadjunta arbitraria, viene básicamente descrita por la traza de operador $(-\partial_x^2|_U)^{1/2}$. A pesar de que en general los autovalores de $\partial_x^2|_U$ no pueden ser computados analíticamente, la traza relevante sí puede tratarse de forma semianalítica. En particular, dado que la función h_U es analítica en k en todo el plano complejo, la traza deseada puede escribirse mediante la derivada logarítmica como una integral sobre el plano complejo [2]. Como hemos dicho, esta generalización es únicamente posible cuando la condición de contorno da lugar a una extensión autoadjunta de \mathcal{M}_F . Esto se debe a que en tal caso las raíces cuadradas de los autovalores de $\partial_x^2|_U$ son siempre reales positivos, lo cual asegura que el hamiltoniano de la teoría cuántica de campos descrito en la introducción es un operador autoadjunto:

$$\mathcal{H} = \sum_{\omega} \hbar\omega \left(a^\dagger(\omega)a(\omega) + \frac{1}{2} \right),$$

siendo las frecuencias ω sobre las que se extiende la suma, las raíces cuadradas de los autovalores de un operador de Schrödinger no-negativo.

Bibliografía

- [1] M. Asorey, G. Marmo, y A. Ibort. *Global Theory of Quantum Boundary Conditions and Topology Change*, Int. J. Mod. Phys. A, 20(05), 1001-1025 (2005).
- [2] M. Asorey y J. M. Muñoz-Castañeda. *Attractive and repulsive Casimir vacuum energy with general boundary conditions*, Nucl. Phys. B, 874(3), 852-876 (2013).
- [3] J. M. Muñoz-Castañeda. *Efectos de borde en Teoría Cuántica de Campos*, tesis doctoral, Universidad de Zaragoza (2009).
- [4] N. Dunford, J.T. Schwartz. *Linear Operators, Part II: Spectral theory, self-adjoint operators in Hilbert space*, Wiley-Interscience (1988).
- [5] G. Grubb. *A characterization of the non local boundary value problems associated with an elliptic operator*, tesis doctoral. Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa - Classe di Scienze, Ser. 3, 22 (1968).
- [6] M. Reed y B. Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics. Volume II: Fourier Analysis, Self-Adjointness*, Academic Press (1975).
- [7] M. Asorey, A. P. Balachandran y J. M. Pérez-Pardo. *Edge states: Topological insulators, superconductors and QCD chiral bags*, Journal of High Energy Physics 2013 (12), 1-26, 73 (2013).
- [8] G.L. Klimchitskaya, V. M. Mostepanenko, M. Bordag, U. Mohideen, *Advances in the Casimir Effect*. Oxford Univ. Press (2009).
- [9] R. Rajaraman. *Solitons and Instantons: An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*, North Holland Publishing Co. (1987).
- [10] S. Coleman. *Aspects of Symmetry*, Cambridge Univ. Press (1988).
- [11] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloe. *Quantum Mechanics, Volume 1*. Wiley (1991).
- [12] C. Kittel. *Introducción a la Física del Estado Sólido*, Ed. Reverté (1975).
- [13] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin. *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston (1975).
- [14] J.J. Sakurai y J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*, Pearson Education, Inc., 2nd ed. (2010).
- [15] J. M. Muñoz-Castañeda, K. Kristen y M. Bordag. *QFT Over the Finite Line. Heat Kernel Coefficients, Spectral Zeta Functions and Selfadjoint Extensions*, Letters in Mathematical Physics, 105(4) 523 (2015).
- [16] J.F. Cornwell. *Group Theory in Physics: an introduction*, Academic, N.Y. (1997).
- [17] G. Bonneau, J. Faraut y G. Valent. *Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics*, Am.J.Phys. 69 322 (2001).
- [18] A. Alonso y B. Simon. *The Birman-Krein-Vishik theory of selfadjoint extensions of semibounded operators*, J. Oper. Theory 4(2) 251-270 (1980).

- [19] M.S Ashbaugh, F. Gesztesy, M. Mitrea, *et al.* *Spectral theory for perturbed krein laplacians in nonsmooth domains*, Adv. Math. **223**(4), 1272-1467 (2010).
- [20] M.S Ashbaugh, F. Gesztesy, M. Mitrea, *et al.* *A survey on the Krein-von Neumann extension, the corresponding abstract buckling problem, and Weyl-type spectral asymptotics asymptotics for perturbed Krein Laplacians in nonsmooth domains*, ArXiv e-prints (2012).

7. Apéndice

7.1. Anexo 1: Código de Mathematica para los momentos en C.C. de Robin

Condiciones de Robin - ContourPlot

Inés Vega González

Como sabemos que el estado fundamental está entre 0 y $\frac{\pi}{L}$, definimos con un *if* una función que devuelve Null (nada) cuando la k esté fuera de ese intervalo, y la función espectral cuando k esté en el intervalo deseado. Lo que hacemos a posteriori es representar las curvas donde dicha función se anula. El resultado es la curva del λ_0 :

```
In[6]:= λ0 = ContourPlot[
  representación de contornos
  {If[k ≤ π,  $\frac{-2 k \cos[k] \sin[a] + (-1 + k^2) \sin[k] + (1 + k^2) \cos[a] \sin[k]}{k}$ , Null] == 0},
  {a, 0, π}, {k, 0, 3 Pi}, ContourStyle → {Red, Thickness → .007},
  {a, 0, π}, {k, 0, 3 Pi}, ContourStyle → {Red, Thickness → .007},
  FrameTicks → {{{0, π, 2 π, 3 π}, {0, π, 2 π, 3 π}}, {{0, π / 4, π / 2, 3 π / 4, π}, None}},
  FrameStyle → Directive[Black, 22],
  FrameLabel → {Style["α", 24], Style[Rotate["k", 270 Degree], 24]};
```

Repetimos lo anterior para el primer estado excitado. En este caso el intervalo es entre π y 2π :

```
λ1 = ContourPlot[
  representación de contornos
  {If[π ≤ k ≤ 2 π,  $\frac{-2 k \cos[k] \sin[a] + (-1 + k^2) \sin[k] + (1 + k^2) \cos[a] \sin[k]}{k}$ , Null] ==
  0}, {a, 0, π}, {k, 0, 3 Pi}, ContourStyle → {Blue, Thickness → .007},
  FrameTicks → {{{0, π, 2 π, 3 π}, {0, π, 2 π, 3 π}}, {{0, π / 4, π / 2, 3 π / 4, π}, None}},
  FrameStyle → Directive[Black, 22],
  FrameLabel → {Style["α", 24], Style[Rotate["k", 270 Degree], 24]};
```

Lo mismo para el 2º estado excitado. Ahora el intervalo es entre 2π y 3π .

```

λ2 = ContourPlot[
$$\frac{-2 k \cos[k] \sin[\alpha] + (-1 + k^2) \sin[k] + (1 + k^2) \cos[\alpha] \sin[k]}{k}, \text{Null}] == 0,
  \{ \alpha, 0, \pi \}, \{ k, 0, 3 \pi \}, \text{ContourStyle} \rightarrow \{ \text{Green}, \text{Thickness} \rightarrow .007 \},
  \text{FrameTicks} \rightarrow \{ \{ \{ 0, \pi, 2 \pi, 3 \pi \}, \{ 0, \pi, 2 \pi, 3 \pi \} \}, \{ \{ 0, \pi / 4, \pi / 2, 3 \pi / 4, \pi \}, \text{None} \} \},
  \text{FrameStyle} \rightarrow \text{Directive}[\text{Black}, 22],
  \text{FrameLabel} \rightarrow \{ \text{Style}["\alpha", 24], \text{Style}[\text{Rotate}["k", 270 \text{Degree}], 24] \};$$

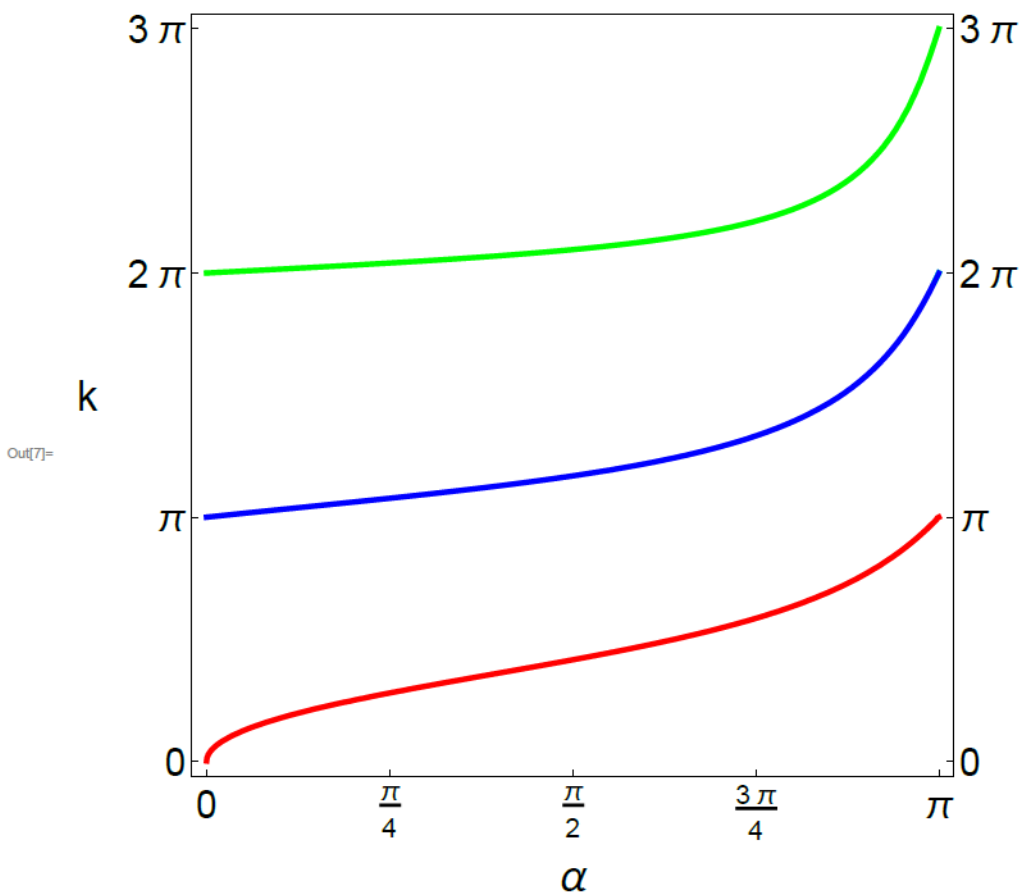
```

Ahora que tenemos cada estado excitado por separado, podemos juntar los tres en una sola gráfica, de manera que cada uno se vea representado por un color:

```

In[7]:= Show[λ0, λ2, λ1]

```



Nótese que este cuaderno valdría para cualesquiera condiciones de contorno sin más que cambiar la función espectral dentro de los If.

Condiciones de Robin - FindInstance

Inés Vega González

Primero, planteamos las ecuaciones que necesitamos resolver y representar:

$$\text{In[]:= } \mathbf{hR[k_ , \alpha_]} := (k^2 + 1) \underset{\text{seno}}{\text{Sin}[k L]} \underset{\text{coseno}}{\text{Cos}[\alpha]} - 2 k \underset{\text{coseno}}{\text{Cos}[k L]} \underset{\text{seno}}{\text{Sin}[\alpha]} + (k^2 - 1) \underset{\text{seno}}{\text{Sin}[k L]}$$

$$\text{In[]:= } \mathbf{fR[k_ , \alpha_]} := \mathbf{hR[k, \alpha]} / k$$

Vamos a tomar L=1:

$$\text{In[]:= } \mathbf{h[k_ , \alpha_]} := (k^2 + 1) \underset{\text{seno}}{\text{Sin}[k]} \underset{\text{coseno}}{\text{Cos}[\alpha]} - 2 k \underset{\text{coseno}}{\text{Cos}[k]} \underset{\text{seno}}{\text{Sin}[\alpha]} + (k^2 - 1) \underset{\text{seno}}{\text{Sin}[k]}$$

$$\text{In[]:= } \mathbf{h[k, a]}$$

$$\text{Out[]:= } -2 k \text{Cos}[k] \text{Sin}[a] + (-1 + k^2) \text{Sin}[k] + (1 + k^2) \text{Cos}[a] \text{Sin}[k]$$

$$\text{In[]:= } \mathbf{f[k_ , \alpha_]} := \mathbf{h[k, \alpha]} / k$$

$$\mathbf{f[k, a]}$$

$$\text{Out[]:= } \frac{-2 k \text{Cos}[k] \text{Sin}[a] + (-1 + k^2) \text{Sin}[k] + (1 + k^2) \text{Cos}[a] \text{Sin}[k]}{k}$$

Vamos a encontrar primero el estado elemental k_0 , que corresponderá con un solución en el intervalo de los k de $[0, \pi]$. Por simplicidad, en las fórmulas vamos a llamar “a” al α . Para que no haya error a valores pequeños, tomamos un *if*:

$$\text{In[]:= } \mathbf{e0[a_]} := \text{If}[a < 0.1, 0, k /. \text{FindInstance}[\{f[k, a] == 0 \&\& 0 < k <= \text{Pi}\}, k]]; \text{si} \quad \text{encuentra caso} \quad \text{número pi}$$

La condición de Neumann:

$$\text{In[]:= } \mathbf{e0[0]}$$

$$\text{Out[]:= } 0$$

La condición de Dirichlet:

$$\text{In[]:= } \mathbf{e0[\text{Pi}]}$$

número pi

$$\text{Out[]:= } \{\pi\}$$

Vamos a sacar una función que nos obtenga las funciones con α fijo para el número de particiones entre 0 y π que queremos :

$$\text{In[]:= } \mathbf{listaalfa0[n_]} := \text{Table}[e0[i], \{i, 0, 3.1416, 3.1416 / n\}] /. \{x_ \} \rightarrow x$$

tabla

Tomemos 10 divisiones de los valores de α :

```
In[5]:= e010 = listaalfa0[10]
```

```
Out[5]= {0, 0.555501, 0.784938, 0.968563, 1.13712, 1.30654, 1.49094, 1.70883, 1.99251, 2.41183, k}
```

```
In[5]:= alfas10 = Table[{i, 0, Pi, Pi / (10)}]
           |tabla |... | número pi
```

```
Out[5]= {0,  $\frac{\pi}{10}$ ,  $\frac{\pi}{5}$ ,  $\frac{3\pi}{10}$ ,  $\frac{2\pi}{5}$ ,  $\frac{\pi}{2}$ ,  $\frac{3\pi}{5}$ ,  $\frac{7\pi}{10}$ ,  $\frac{4\pi}{5}$ ,  $\frac{9\pi}{10}$ ,  $\pi$ }
```

```
In[56]:= k /. FindInstance[{f[k,  $\pi$ ] == 0 && 0 < k ≤ Pi}, k]
           |encuentra caso | número pi
```

```
Out[56]= { $\pi$ }
```

Vemos que da error para el último valor de la medida, el que se corresponde con un valor $\alpha = \pi$, que si lo calculamos por separado nos da el valor π (correcto):

para ahorrarnos problemas lo vamos a eliminar. Vamos a poner los valores de k junto con su correspondiente en una tabla:

```
In[5]:= kcero10 = Table[{alfas10[[i]], e010[[i]]}, {i, 10}]
           |tabla
```

```
Out[5]= {{0, 0}, { $\frac{\pi}{10}$ , 0.555501}, { $\frac{\pi}{5}$ , 0.784938}, { $\frac{3\pi}{10}$ , 0.968563}, { $\frac{2\pi}{5}$ , 1.13712},
          { $\frac{\pi}{2}$ , 1.30654}, { $\frac{3\pi}{5}$ , 1.49094}, { $\frac{7\pi}{10}$ , 1.70883}, { $\frac{4\pi}{5}$ , 1.99251}, { $\frac{9\pi}{10}$ , 2.41183}}
```

7.2. Anexo 2: Código de Mathematica para las energías en C.C. de Robin

Condiciones de Robin - ContourPlot

Inés Vega González

En este caso, por hacer un desarrollo más limpio, vamos a definir primero la función espectral:

$$\text{In[1]:= } fR[k_, a_] = \frac{-2 k \cos[k] \sin[a] + (-1 + k^2) \sin[k] + (1 + k^2) \cos[a] \sin[k]}{k};$$

Como sabemos que el estado fundamental está entre 0 y $\frac{\pi}{L}$, definimos con un *if* una función que devuelve Null (nada) cuando la k esté fuera de ese intervalo, y la función espectral cuando k esté en el intervalo deseado. En este caso el cambio está en que estamos tomando $k = \sqrt{E}$ en vez de los momentos en la función espectral, aunque la nomenclatura pueda ser dudosa que hacemos a posteriori es representar las curvas donde dicha función se anula. El resultado es la curva del λ_0 :

```
λ0 = ContourPlot[ {If[k ≤ π^2, fR[Sqrt[k], a], Null] == 0},
  |representación ... |si          |raíz cuadrada |expresión nula
  {a, 0, π}, {k, 0, (3 π)^2}, ContourStyle → {Red, Thickness → .007},
  |estilo de contorno |rojo |grosor
  FrameTicks → {{0, π^2, (2 π)^2, (3 π)^2}, {0, π^2, (2 π)^2, (3 π)^2}},
  |marcas del marco
  {{0, π/4, π/2, 3 π/4, π}, None}}, FrameStyle → Directive[Black, 22],
  |ninguno |estilo de marco |directiva |negro
  FrameLabel → {Style["α", 24], Style[Rotate["E=k^2", 270 Degree], 24]};
  |etiqueta de marco |estilo          |estilo |rota          |número e |grado
```

Repetimos lo anterior para el primer estado excitado. En este caso el intervalo es entre π y 2π :

```
λ1 = ContourPlot[ {If[π^2 ≤ k ≤ (2 π)^2, fR[Sqrt[k], a], Null] == 0},
  |representación ... |si          |raíz cuadrada |expresión nula
  {a, 0, π}, {k, 0, (3 π)^2}, ContourStyle → {Blue, Thickness → .007},
  |estilo de contorno |azul |grosor
  FrameTicks → {{0, π^2, (2 π)^2, (3 π)^2}, {0, π^2, (2 π)^2, (3 π)^2}},
  |marcas del marco
  {{0, π/4, π/2, 3 π/4, π}, None}}, FrameStyle → Directive[Black, 22],
  |ninguno |estilo de marco |directiva |negro
  FrameLabel → {Style["α", 24], Style[Rotate["E=k^2", 270 Degree], 24]};
  |etiqueta de marco |estilo          |estilo |rota          |número e |grado
```

Lo mismo para el 2º estado excitado. Ahora el intervalo es entre 2π y 3π .


```

λ2 = ContourPlot[ {If[ (2 π)^2 - .1 ≤ k ≤ (3 π)^2, fR[Sqrt[k], a], Null] == 0},
  [representación ... [si [raíz cuadrada [expresión nula
  {a, 0, π}, {k, 0, (3 π)^2}, ContourStyle → {Green, Thickness → .007},
  [estilo de contorno [verde [grosor
  FrameTicks → {{0, π^2, (2 π)^2, (3 π)^2}, {0, π^2, (2 π)^2, (3 π)^2}},
  [marcas del marco
  {{0, π/4, π/2, 3 π/4, π}, None}} FrameStyle → Directive[Black, 22],
  [ninguno [estilo de marco [directiva [negro
  FrameLabel → {Style["α", 24], Style[Rotate["E=k^2", 270 Degree], 24]}}];
  [etiqueta de marco [estilo [estilo [rota [número e [grado

```

Ahora que tenemos cada estado excitado por separado, podemos juntar los tres en una sola gráfica, de manera que cada uno se vea representado por un color:

