



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

DISPERSIÓN CUÁNTICA UNIDIMENSIONAL

Autor: Adrián González Senovilla
Tutor/es/as: Jose Maria Muñoz Castañeda
Año: 2025

Resumen

Este trabajo se centra en el estudio de la dispersión cuántica unidimensional con un objetivo: caracterizar por completo el espacio de Hilbert del potencial dispersor. Para ello, primero se deducen las propiedades de dispersión en una región asintóticamente alejada. Luego, a través del teorema de Levinson y del estudio de los polos de dispersión, se caracteriza el espectro discreto de estados ligados. El trabajo finaliza mostrando dos ejemplos esclarecedores: el potencial delta y los potenciales transparentes. Estos últimos son relevantes para el estudio de los solitones.

Abstract

The present work is aimed at the study of quantum unidimensional scattering with one objective: to characterize the whole Hilbert space of the scatterer potential. For this, firstly the properties of scattering at asymptotic ranges are deduced. Then, using Levinson's theorem and through the study of scattering poles, the bounded spectrum is studied. We conclude by showing two enlightening examples: the delta potential and transparent potentials. The latter are relevant for the study of solitons.

Índice general

1. Introducción	4
1.1. Estructura del Trabajo	4
2. Dispersión Cuántica Unidimensional	5
2.1. Planteamiento Inicial	5
2.2. Estados de Dispersión	6
2.2.1. Expresión Alternativa	7
2.2.2. Correlaciones Entre Estados Asintóticos	8
2.2.3. Matriz de Dispersión	9
2.3. Simetrías del Potencial	10
2.3.1. Inversión Temporal	10
2.3.2. Paridad	11
2.3.3. Potencial Asimétrico en la Zona Asintótica	11
2.4. Ejemplo: Potencial Delta	13
3. Estudio de los Estados Ligados a Través de la Dispersión	15
3.1. Polos de la Dispersión	15
3.1.1. Estados Ligados	16
3.1.2. Resonancias	17
3.2. Teorema de Levinson	18
3.2.1. Demostración Alternativa	19
3.3. Ejemplos	21
3.3.1. Potencial Delta	21
3.3.2. Doble Delta	23
3.3.3. Potenciales Transparentes	26
4. Conclusiones	31
4.1. Reflexiones Particulares	31

Capítulo 1

Introducción

En mecánica cuántica, el problema de encontrar los estados físicos de una partícula sometida a un potencial se reduce a calcular las soluciones de cuadrado integrable de la ecuación de Schrödinger con energía real. A groso modo, se encuentran dos tipos de soluciones: las soluciones de dispersión, con energía positiva y las soluciones ligadas, con energía negativa.

En muchos casos, el potencial es desconocido a priori, de modo que resulta imposible calcular las soluciones directamente. Pongamos por caso que nos encontramos frente a un átomo desconocido que ejerce una influencia desconocida sobre sus electrones, ¿Cómo podemos extraer los estados accesibles de los electrones, dentro y fuera del átomo? Mediante experimentos de dispersión, bombardeando el átomo con partículas, es posible caracterizar el espectro de soluciones con energía positiva del potencial atómico. El problema lo encontramos cuando tratamos de caracterizar experimentalmente los estados ligados; no es posible medirlos directamente sin romper el núcleo. Afortunadamente, hay una solución, y es la que exploraremos a lo largo de este trabajo: existe una relación teórica entre los estados de dispersión y los ligados, que permite obtener el espectro de energías ligadas una vez que se ha caracterizado el problema de dispersión.

1.1. Estructura del Trabajo

Empezamos en el Capítulo 2. Allí introduciremos las características generales de los potenciales dispersores y encontraremos una base de las soluciones de dispersión en función del número de ondas, definiendo las amplitudes de dispersión y los desfases, así como sus propiedades. Quedará ejemplificado con el potencial delta, que es un potencial muy simple.

En el Capítulo 3 tomaremos estas soluciones de dispersión y las expandiremos a números de ondas complejos. Estas soluciones no serán en general físicas, pero a través de un estudio de sus polos, obtendremos información sobre los estados físicos; encontraremos polos que se manifestarán en resonancias de la dispersión, y otros que nos indicarán las soluciones ligadas de los sistemas. Después, deduciremos el teorema de Levinson, que nos proporcionará un recuento de los polos asociados a los estados ligados, obteniendo así una expresión para el número total de estados ligados. Se concluirá con algunos ejemplos, donde se volverá a tratar el potencial delta, y se estudiará el caso de la doble delta, mucho más esclarecedor que la delta simple. También se estudiarán los potenciales transparentes y sus familias. Estos últimos están íntimamente relacionados con los problemas de solitones.

Capítulo 2

Dispersión Cuántica Unidimensional

En este capítulo caracterizaremos los estados de dispersión. Para ello, se sigue el desarrollo del libro de mecánica cuántica de Galindo [3], junto con un paper de J. Luis Boya sobre la dispersión unidimensional [2].

2.1. Planteamiento Inicial

Partimos de un sistema cuántico en un espacio unidimensional, representado por la coordenada x . Consideremos el siguiente experimento de dispersión: enviamos un haz de partículas desde el extremo izquierdo del eje ($x \rightarrow -\infty$) hacia el origen ($x \sim 0$), donde sufren la influencia local de un potencial $V(x)$. Si la energía de las partículas incidentes no es excesivamente mayor que la magnitud del potencial, se observa que el haz se divide en dos: algunas partículas se transmiten más allá del origen, mientras que otras se reflejan de vuelta.

El Hamiltoniano del sistema puede escribirse mediante la ecuación de Schrödinger unidimensional

$$H\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) \quad (2.1)$$

cuyos estados propios cumplen la igualdad

$$\psi''(x) + e\psi(x) = v(x)\psi(x) \quad (2.2)$$

con $e = \frac{2m}{\hbar^2}E$ y $v(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x)$, donde E es la energía de la partícula.

Por tal que sea posible hablar de dispersión, la partícula debe evolucionar libremente en la región alejada del origen, es decir, el potencial no debe afectar la función de onda en esa región. Para ello, debemos imponer ciertas condiciones sobre el potencial. La más importante de ellas, que debe decaer lo suficientemente rápido, en concreto

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} x^2 V(x) = 0 \quad (2.3)$$

A demás, por tal de conservar la probabilidad inicial, y evitar que haya emisión o absorción de energía, el potencial también debe ser real (un operador hermítico $V = V^\dagger$). Tampoco consideramos potenciales dependientes del tiempo o del momento.

Con estas condiciones, el espacio se divide en dos regiones: la *región de interacción*, cerca del origen, donde el sistema se rige por el Hamiltoniano completo (H), y la *región asintótica*, lejos del origen, donde el potencial es despreciable y el sistema sigue la evolución libre ($H_0 = \frac{P^2}{2m}$). Asimismo, la región asintótica en una dimensión está seccionada en dos partes no conexas: el extremo izquierdo y el extremo derecho del eje. Esta división se debe a que en una dimensión no existe ninguna transformación continua que pueda trasladar un punto de un extremo al otro sin pasar por el origen. Las transformaciones encargadas de ello son las del grupo ortogonal $O(1)$, que es un grupo de transformaciones discontinuas, pues sólo contiene dos elementos.

Estudiemos ahora el espectro de estados propios del Hamiltoniano. Las soluciones con energía negativa, $e < 0$, no podrán acceder a la zona asintótica. Se quedarán confinadas cerca del origen y crearán el espectro de *estados ligados*. Estos estados son normalizables (de cuadrado integrable) y forman un espectro numerable (es decir, cuantizado, ψ_i , $i \in \mathbb{N}$). Por su parte, las soluciones con energía positiva, $e > 0$, recorrerán la región asintótica como ondas libres con número de ondas k , y la energía se podrá escribir como $e = (\pm k)^2$, para $k \in \mathbb{R}^+$ formando así un espectro continuo doblemente degenerado. Estos últimos son nuestros *estados de dispersión*, candidatos a ser capturados por los detectores.

La forma que toman las soluciones de (2.2) en la región de interacción suele ser muy diversa según el potencial y es difícil de calcular. Además, es una región en la que no se recogen medidas experimentales. Por lo tanto, para estudiar el fenómeno de dispersión trataremos de olvidarnos de esa zona y, en cambio, centraremos nuestra atención en la región asintótica. Allí encontraremos la información necesaria de la partícula tanto en el estado inicial de incidencia como en el estado final disperso.

Podemos esbozar de forma muy genérica cómo se espera que sean las soluciones de dispersión en la región asintótica. El Hamiltoniano es H_0 y tiene una base de ondas planas $\{e^{ikx}, e^{-ikx}\}$ para cada energía $e = k^2 > 0$. Las soluciones son una combinación lineal de la base

$$\psi_{e>0}(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad k > 0 \quad (2.4)$$

donde los factores A, B, F, G dependen de k y de la forma del potencial $v(x)$. Aunque haya cuatro factores por determinar, sólo dos son independientes.

Esta función está acotada para los estados de dispersión, pues k debe ser real, y la función permanece normalizable en los extremos de los ejes. En los estados ligados, por el contrario, $e < 0$ y el número de ondas debe ser imaginario puro $k = i\kappa \in \mathbb{I}$, convirtiendo las exponenciales complejas (funciones acotadas) en exponenciales reales (funciones que divergen hacia uno de los dos ejes)

$$\psi_{e<0}(x) = \begin{cases} Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}, & x \rightarrow -\infty \\ Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.5)$$

Como estas funciones no siempre son normalizables, tomando $\kappa > 0$, se debe imponer que las soluciones físicas ligadas cumplan $A(k) = 0$ y $G(k) = 0$.

2.2. Estados de Dispersión

Consideremos el caso de una onda libre incidente desde un lado y veamos cómo se dispersa.

En general, la dispersión no es simétrica desde ambos lados, de modo que sus soluciones tampoco son equivalentes. Indicaremos con $\psi^R(x)$ la solución de la onda incidente por la izquierda e^{ikx} , caso que llamaremos dispersión *normal*, y con $\psi^L(x)$ la solución de la onda incidente por la derecha e^{-ikx} ,

caso que llamaremos dispersión *zurda*. Estas dos soluciones son linealmente independientes y bastan para crear una base de los estados de dispersión.

Veamos las expresiones en la zona asintótica. Consideramos la onda incidente desde la izquierda, en dispersión normal, y partimos de la solución general para estados de dispersión (2.4). Tenemos dos condiciones de contorno. Una es que la onda incidente desde la izquierda, e^{ikx} , debe estar normalizada: $A = 1$. La otra condición es que no incide ninguna partícula desde el lado contrario, así que $G = 0$. Las demás constantes, B y F , son renombradas como b y t . Para el caso de que incidiese desde el otro lado, el desarrollo sería análogo. De este modo, las soluciones en la zona asintótica son las siguientes para cada caso:

$$\psi^R(x) = \begin{cases} e^{ikx} + b^R(k)e^{-ikx}, & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ t^R(k)e^{ikx}, & \text{si } x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.6)$$

$$\psi^L(x) = \begin{cases} t^L(k)e^{-ikx}, & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ e^{-ikx} + b^L(k)e^{+ikx}, & \text{si } x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.7)$$

En ambas se describe una onda libre incidente que, al llegar a la región de interacción, se divide en una parte transmitida con amplitud $t^{R,L}(k)$ y otra reflejada con amplitud $b^{R,L}(k)$. Las probabilidades de que la partícula elija dispersarse hacia adelante o hacia atrás reciben el nombre de coeficientes de transmisión ($T^{R,L}$) y de reflexión ($R^{R,L}$)

$$T^{R,L} \equiv |t^{R,L}(k)|^2 \quad R^{R,L} \equiv |b^{R,L}(k)|^2 \quad (2.8)$$

por conservación del flujo del campo, su suma debe ser igual a la probabilidad incidente (se desarrolla en la sección 2.2.2)

$$T^{R,L} + R^{R,L} = 1 \quad (2.9)$$

2.2.1. Expresión Alternativa

Hay otra forma de escribir la función de onda que enfatiza aún más el efecto de la dispersión. Consiste en redefinir la amplitud de transmisión de la siguiente forma

$$t(k) = 1 + f(k) \quad (2.10)$$

Con esto, se consigue escribir las funciones de onda (2.6) y (2.7) como la suma de dos términos

$$e^{\pm ikx} + \psi_{\text{disp}}^{R,L}(x) \quad (2.11)$$

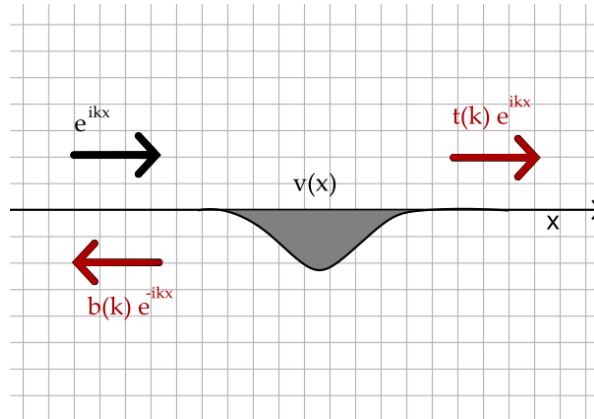


Figura 2.1: Esquema de la dispersión normal

El primer término es una onda libre, y describe la partícula en el caso de potencial cero y dispersión nula. El segundo término son los cambios que sufre la solución libre por la presencia del potencial, la podemos interpretar como la parte de la onda que ha sufrido la dispersión.

Por conservación del flujo, para dar la onda total transmitida, $f(k)$ debe interferir negativamente y contribuir a la pérdida de flujo transmitido, lo que podría interpretarse como una sombra.

Con esta nueva expresión, se puede ver el efecto de dispersión desde otro ángulo. Como si la onda incidente no se viese desviada, pero el potencial fuera capaz de emitir una onda $\psi_{\text{disp}}^{R,L}(x)$ como respuesta a su paso: una hacia adelante con amplitud $f(k)$ y otra hacia atrás con amplitud $b(k)$. Es tal y como sucede en el electromagnetismo, por ejemplo, cuando una onda incide sobre una placa de metal: los electrones en la superficie se excitan y responden de vuelta con otra onda, y es solo el efecto neto de ambas ondas el que produce el efecto de reflexión.

Con $f(k)$ y $b(k)$ se define el equivalente unidimensional de la amplitud de dispersión (usada comúnmente en la dispersión tridimensional) para las dos direcciones del sistema, que son los coeficientes de dispersión hacia adelante ($\sigma_{\rightarrow}$) y hacia atrás ($\sigma_{\leftarrow}$)

$$\sigma_{\rightarrow} \equiv |f(k)|, \quad \sigma_{\leftarrow} \equiv |b(k)| \quad (2.12)$$

Si se escribe la ecuación de conservación del flujo (2.9) en función de los coeficientes de dispersión (σ) se obtiene el llamado *teorema óptico*

$$\sigma_{\text{tot}} + 2\Re(f) = 0 \quad (2.13)$$

donde $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\leftarrow} + \sigma_{\rightarrow}$. El valor de este teorema es que permite encontrar el flujo total dispersado partiendo únicamente de la dispersión hacia adelante.

El teorema óptico nos dice que la dispersión siempre debe contener una componente hacia adelante. De hecho, es intuitivo: siempre que la onda se disperse hacia otras direcciones, la componente transmitida deberá disminuir, por conservación de la probabilidad, y la encargada de ello debe ser la onda dispersada hacia adelante. Dicho de otra manera, siempre que haya dispersión, también se proyectará una sombra.

Luis J. Boya realiza todo su análisis de la dispersión con esta notación en su paper [2]. Tiene la ventaja de que las ecuaciones se asimilan más a aquellas de la dispersión tridimensional.

2.2.2. Correlaciones Entre Estados Asintóticos

La misión para poder estudiar la dispersión es encontrar correlaciones entre las amplitudes reflejadas y transmitidas.

Nos aprovechamos de que el Wronskiano de dos funciones con el mismo autovalor es constante en x para encontrar relaciones entre las soluciones de dispersión en cada lado de la región asintótica. Recordamos que el Wronskiano de dos funciones es $W_{f_1, f_2}(x) = f_1(x)f_2'(x) - f_1'(x)f_2(x)$, donde $f'(x) \equiv \frac{df}{dx}(x)$. Entonces, mezclando las funciones $\psi^{R,L}$ tenemos las siguientes relaciones

$$\frac{i}{2} W_{\psi^{R,L}, \psi^{R,L*}} = k(1 - |b^{R,L}(k)|^2) = k|t^{R,L}(k)|^2 \quad (2.14)$$

$$\frac{i}{2} W_{\psi^L, \psi^R} = k t^R = k t^L \quad (2.15)$$

$$\frac{i}{2} W_{\psi^L, \psi^{R*}} = -k b^R(k) t^{L*}(k) = k b^{L*}(k) t^R(k) \quad (2.16)$$

La ecuación (2.14) es la ecuación del flujo en cada uno de los extremos, y la igualdad entre ambos indica que existe *conservación del flujo*. Reescrita en términos de los coeficientes de reflexión y transmisión,

$$T^{R,L} + R^{R,L} = 1 \quad (2.17)$$

De la ecuación (2.15) se tiene inmediatamente que las amplitudes de transmisión normal y zurda son exactamente iguales

$$t^R = t^L \equiv t \quad (2.18)$$

De ahora en adelante, y por simplicidad, bastará con escribir $t(k)$. Finalmente, la ecuación (2.16) implica que las amplitudes de reflexión normal y zurda difieren solamente en una fase

$$|b^R(k)| = |b^L(k)| \quad (2.19)$$

y brinda una relación entre las fases de las amplitudes

$$2\phi_t = \phi_r^R + \phi_r^L + \pi \quad (2.20)$$

donde se han escrito las amplitudes en su forma polar según $t = |t|e^{i\phi_t}$ y $b^{R,L} = |b^{R,L}|e^{i\phi_r^\pm}$.

Las ecuaciones (2.18) y (2.19) implican que la probabilidad de reflexión y transmisión son las mismas tanto en dispersión normal como en zurda

$$T^R = T^L, \quad R^R = R^L \quad (2.21)$$

2.2.3. Matriz de Dispersión

Al igual que las soluciones ψ^R y ψ^L se dispersan con amplitudes t y $b^{R,L}$, si construimos una solución general, mezcla de la incidencia desde la izquierda con amplitud α , y desde la derecha con amplitud β

$$\psi = \alpha\psi^R + \beta\psi^L, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (2.22)$$

entonces su onda saliente será la dispersada hacia la derecha con amplitud $D = (\alpha t(k) + \beta b^L(k))$ y hacia la izquierda con amplitud $I = (\alpha b^R(k) + \beta t(k))$.

Las amplitudes salientes (D, I) están relacionadas con las amplitudes incidentes (α, β) a través de la *matriz de dispersión*

$$S(k) = \begin{pmatrix} t & b^L \\ b^R & t \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

$$\begin{pmatrix} D \\ I \end{pmatrix} = S(k) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

La matriz de dispersión debe ser *unitaria*, para que el flujo previo a la colisión se conserve después de ser dispersado. De hecho, esta propiedad viene implícita en las relaciones entre amplitudes de la sección 2.2.2. Veámoslo. Si las escribimos en su forma polar $t(k) = |t|e^{i\phi_t}$, $b^{R,L}(k) = |b|e^{i\phi_r^{R,L}}$ y empleamos (2.18), (2.19) y (2.20), la matriz (2.23) toma la forma

$$S(k) = \begin{pmatrix} |t| & |b|e^{i(\phi_r^L - \phi_t)} \\ -|b|e^{-i(\phi_r^L - \phi_t)} & |t| \end{pmatrix} e^{i\phi_t} \quad (2.25)$$

que se trata de la expresión genérica de una matriz unitaria,

$$S(k) = \begin{pmatrix} a & c \\ -c^* & a^* \end{pmatrix} e^{i\phi}, \quad |a|^2 + |c|^2 = 1 \quad (2.26)$$

donde además se cumple que $a = a^*$.

Como toda matriz unitaria, es diagonalizable en autovalores de módulo uno, o lo que es lo mismo, en desfases

$$S(k) = \begin{pmatrix} e^{2i\delta_0} & 0 \\ 0 & e^{2i\delta_1} \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

En efecto, al resolver la ecuación característica de (2.25), $\text{Det}(S - \lambda) = 0$, encontramos los valores propios unitarios

$$\lambda_0 = e^{i\phi_t}(|t| + i|b|) \equiv e^{2i\delta_0} \quad (2.28)$$

$$\lambda_1 = e^{i\phi_t}(|t| - i|b|) \equiv e^{2i\delta_1} \quad (2.29)$$

de modo que los desfases son

$$2(\delta_0 + \delta_1) = 2\phi_t \quad (2.30)$$

y nos indica que, cuando pasemos una ecuación de la base $\{\psi^R, \psi^L\}$ a la base diagonalizada $\{\psi_0, \psi_1\}$, los desfases tomarán el mismo papel que la fase de la amplitud transmitida.

A cada valor propio le corresponde un vector propio, también conocido como *modo de dispersión*, y bajo la dispersión sólo sufren un desfase. Claramente, los dos modos se dispersan sin mezclarse, o dicho de otra forma, cada modo define un subespacio invariante bajo la dispersión.

La forma general de los modos de dispersión se obtiene resolviendo la ecuación de autovalores $S(k)\psi = \lambda\psi$:

$$\psi_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\frac{b^*}{b}}} \\ i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i(\phi_t - \phi_r^L + \frac{\pi}{2})} \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{-\frac{b^*}{b}}} \\ i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i(\phi_t - \phi_r^L - \frac{\pi}{2})} \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

Haciendo uso de la relación entre fases (2.20) y (2.30), el determinante de $S(k)$ se escribe de la siguiente forma

$$\text{Det}[S(k)] = t^R t^L - b^R b^L = e^{2i\phi_t} = e^{2i(\delta_0 + \delta_1)} \quad (2.33)$$

2.3. Simetrías del Potencial

Veamos cómo se comportan las amplitudes de dispersión, $t(k)$ y $b(k)$, bajo las simetrías del potencial. Las más importantes son la inversión temporal y la inversión espacial, pues contribuyen a igualar los procesos de dispersión normal y zurda. Además, analizaremos el caso en que el potencial tenga límites desiguales en las regiones asintóticas. En este último escenario perderemos simetrías en la dispersión, y habrá un rango de energías en el que sólo sea factible la dispersión desde uno de los dos lados.

2.3.1. Inversión Temporal

La inversión temporal invierte el sentido del movimiento y transforma un potencial dependiente del momento de la forma $v(x, p) \rightarrow v(x, -p)^*$. En nuestro caso, que consideramos potenciales locales y reales, $v(x)$, independientes del tiempo y del momento, la invarianza bajo inversión temporal está asegurada. Esto implica la igualdad de las amplitudes de transmisión para dispersión normal y zurda (resultado que ya hemos obtenido previamente en la sección 2.2.2 a partir del Wronskiano), pues la inversión temporal conlleva el intercambio de las partículas entrantes con las salientes, y $k \rightarrow -k$

$$t^R(k) = t^L(k) \equiv t(k) \quad (2.34)$$

2.3.2. Paridad

Si un potencial es par, $v(x) = v(-x)$, e independiente del tiempo, entonces las soluciones de dispersión que incidan por la derecha deben ser equivalentes a las que incidan por la izquierda. Esto implica que las amplitudes de reflexión normal y zurda también deben ser iguales

$$b^R(k) = b^L(k) \equiv b(k) \quad (2.35)$$

Los potenciales pares tienen además una propiedad muy especial, y es que dispersan las funciones pares e impares independientemente. Veremos que estos son sus modos propios de dispersión.

La igualdad entre amplitudes de reflexión conlleva, a partir de la relación (2.20) entre fases, que $\phi_t - \phi_r = \frac{\pi}{2}$, y sustituyendo en (2.31) y (2.32) se tienen los siguientes modos de dispersión,

$$\psi_{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

$$\psi_{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

Recordemos que estos vectores están escritos en la base de ondas planas, e^{ikz} y e^{-ikz} , así que son equivalentes a las siguientes funciones

$$\psi_{(+)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{ikz} + e^{-ikz}) = \frac{2}{\sqrt{2}} \cos(kz) \quad (2.38)$$

$$\psi_{(-)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{ikz} - e^{-ikz}) = \frac{2i}{\sqrt{2}} \sin(kz) \quad (2.39)$$

que, en efecto, es la descomposición por paridad de la onda.

Los potenciales pares son el equivalente unidimensional de los potenciales radiales tridimensionales. En ambos, el sistema sólo depende de la distancia radial y puede definirse una constante del movimiento angular, con cuyos valores se puede definir una base de la energía: en una dimensión es la base por paridad $\{\psi_{(+)}, \psi_{(-)}\}$, mientras que en tres dimensiones es la base en ondas parciales $\{\psi_l\}_{l \in \mathbb{N}}$. Cada onda parcial tiene el momento angular y la paridad bien definidas. De hecho, la onda “s” (la onda parcial con momento angular nulo) sobre una recta que pase por el origen, se corresponde con la solución par $\psi_{(+)}$ en una dimensión.

Por (2.28) y (2.29), los valores propios de cada paridad son

$$e^{2i\delta_+} = t(k) + b(k) \quad (2.40)$$

$$e^{2i\delta_-} = t(k) - b(k) \quad (2.41)$$

La relación inversa de (2.40) y (2.41) da las amplitudes en función de los desfases

$$t(k) = \frac{1}{2}(e^{2i\delta_+} - e^{2i\delta_-}) \quad (2.42)$$

$$b(k) = \frac{1}{2}(e^{2i\delta_+} + e^{2i\delta_-}) \quad (2.43)$$

2.3.3. Potencial Asimétrico en la Zona Asintótica

Hasta ahora, el potencial se anulaba en la región asintótica, o lo que es lo mismo, $v(x)$ tendía a un valor constante uniformemente en ambos lados. Ahora nos ponemos en un caso distinto, y permitimos que el potencial tienda a un valor distinto en cada lado del eje

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} v(x) = V_z, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} v(x) = V_d \quad (2.44)$$

Tomemos $V_z < V_d$. El potencial se comporta entonces como un peldaño a gran escala y hay tres intervalos de energía a considerar:

1) $e > V_d$

La onda es libre en todo el eje, existe dispersión normal y zurda, pero se mueve con distinto número de ondas en cada uno de los dos lados, pues la energía cinética no es la misma:

$$k_z \equiv (e - V_z)^{1/2}, \quad k_d \equiv (e - V_d)^{1/2} \quad (2.45)$$

Las soluciones son las iguales que en (2.6) y (2.7) con los números de ondas correspondientes

$$\psi^R(x) = \begin{cases} e^{ik_z x} + b^R e^{-ik_z x}, & x \rightarrow -\infty \\ t^R e^{ik_d x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.46)$$

$$\psi^L(x) = \begin{cases} t^L e^{-ik_z x}, & x \rightarrow -\infty \\ e^{-ik_d x} + b^L e^{ik_d x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.47)$$

Las amplitudes de dispersión normal y zurda se relacionan a partir de los mismos Wronskianos de la sección 2.2.2, solo que ahora los números de ondas no se simplifican de las ecuaciones

$$\frac{i}{2} W_{\psi^R, \psi^{R*}} = k_z(1 - |b^R|^2) = k_d |t^R|^2 \quad (2.48)$$

$$\frac{i}{2} W_{\psi^L, \psi^{L*}} = -k_z |t^L|^2 = -k_d(1 - |b^L|^2) \quad (2.49)$$

$$\frac{i}{2} W_{\psi^R, \psi^L} = k_z t^L = k_d t^R \quad (2.50)$$

Las ecuaciones (2.48) y (2.49) son las que describen la conservación del flujo de la onda. Esta vez no se conserva la suma de probabilidades, sino que se añade también un factor cociente entre los números de onda

$$R^R + T^R = 1 \quad \text{con} \quad R^R = |b^R|^2, \quad T^R = \frac{k_d}{k_z} |t^R|^2 \quad (2.51)$$

$$R^L + T^L = 1 \quad \text{con} \quad R^L = |b^L|^2, \quad T^L = \frac{k_z}{k_d} |t^L|^2 \quad (2.52)$$

La ecuación (2.50) antes aseguraba la igualdad entre las amplitudes de transmisión normal y zurda, pero ahora se añade un factor de proporcionalidad

$$t^L = \frac{k_d}{k_z} t^R \quad (2.53)$$

2) $V_z < e < V_d$

En este intervalo, el espectro de soluciones sigue siendo continuo, pero ya no está doblemente degenerado. Perdemos las soluciones de dispersión zurda, pues es imposible incidir a esa energía por el lado izquierdo. Esto es porque, como $k_d \in \mathbb{I}$, las soluciones en el extremo derecho del eje ya no son ondas libres sino que ahora son exponenciales reales que se desvanecen

$$\psi^R(x) = \begin{cases} e^{ik_z x} + b e^{-ik_z x}, & x \rightarrow -\infty \\ t e^{-k_d x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.54)$$

El cálculo del flujo del campo a partir del Wronskiano revela que tenemos reflexión total

$$W_{\psi^R, \psi^{R*}} = |b|^2 - 1 = 0 \implies |b|^2 = 1 \quad (2.55)$$

Claro, la partícula no es capaz de penetrar el potencial y por conservación del flujo debe salir del todo reflejada.

3) $e < V_z$

Este es el espectro discreto de estados ligados de $v(x)$. La dispersión ya no es posible.

2.4. Ejemplo: Potencial Delta

El potencial delta es una función con soporte en un único punto del eje: el origen. Puede verse como un grano de arena en mitad del espacio, con el que la onda tropieza con mayor o menor medida en función de la magnitud g

$$v(x) = g\delta(x) \quad (2.56)$$

Dispersa por separado los modos con paridad bien definida porque es una función par. No solo eso, además, no presenta dispersión para la onda impar. La razón es que esta es nula en el origen y no interactúa con el potencial. Como dispersa solo uno de los dos modos, se dice que la dispersión es unimodal, en modo par.

La ecuación de Schrödinger para el potencial delta es

$$\psi''(x) = (g\delta(x) - k^2)\psi(x) \quad (2.57)$$

Nos dedicamos a encontrar las soluciones de dispersión, que son libres salvo en el origen

$$\psi^R(x) = \begin{cases} e^{ikx} + b(k)e^{-ikx}, & x < 0 \\ t(k)e^{ikx}, & x > 0 \end{cases} \quad (2.58)$$

Podemos ahorrarnos los superíndices en las amplitudes de dispersión pues no son necesarios en los potenciales pares. Por continuidad de la función en $x = 0$,

$$1 + b(k) = t(k) \quad (2.59)$$

La discontinuidad de la derivada puede encontrarse integrando (2.57) en un entorno muy cercano al origen

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = g \psi(0) \quad (2.60)$$

de aquí pueden aislarse las amplitudes de transmisión y reflexión

$$t(k) = \frac{2ik}{2ik - g}, \quad b(k) = \frac{g}{2ik - g} \quad (2.61)$$

Sus ceros marcan cuándo domina una de las dos dispersiones

$$t(0) = 0, \quad b(0) = -1 \quad (2.62)$$

$$t(\infty) = 1, \quad b(\infty) = 0$$

En el límite a bajas energías, $k \rightarrow 0$, hay reflexión total. Este es el comportamiento genérico de los potenciales a bajas energías; cuando la energía se reduce, la onda tiende a reflejarse entera con un desfase de π . En cambio, en el límite de altas energías, $k \rightarrow \infty$, se turnan los papeles y hay transmisión total, sin desfase alguno. La dispersión tiende a desaparecer, pues el efecto del potencial se hace proporcionalmente irrisorio. Puede verse a través de la Figura 2.2, donde se representan los coeficientes de transmisión y reflexión

$$T = \frac{k^2}{(k + ig/2)(k - ig/2)}, \quad R = \frac{g^2/4}{(k + ig/2)(k - ig/2)} \quad (2.63)$$

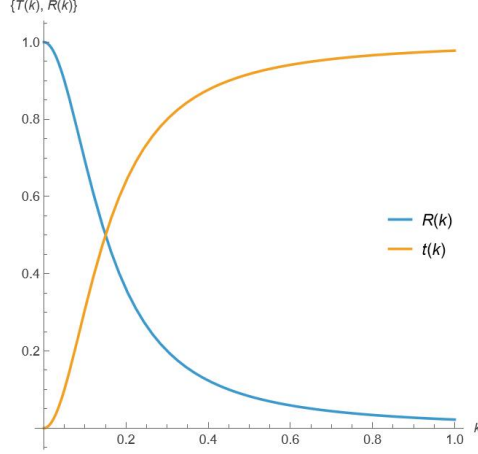


Figura 2.2: Coeficientes de dispersión para la función delta con $g = 0,3$

Los desfases de cada paridad se obtienen con las amplitudes de dispersión a partir de las ecuaciones (2.40) y (2.41)

$$e^{2i\delta_+} = t(k) + b(k) = \frac{2ik + g}{2ik - g} \quad (2.64)$$

$$e^{2i\delta_-} = t(k) - b(k) = 1 \quad (2.65)$$

Como hemos avanzado antes, el desfase de la onda impar es nulo. El único modo que se dispersa es el modo par,

$$\delta_+(k) = \text{Arctan}\left(\frac{-g}{2k}\right), \quad \delta_-(k) = 0 \quad (2.66)$$

Los desfases no están unívocamente definidos. Pueden tomarse de forma equivalente de cualquier rama de la función arcotangente. Por convención, se elige la rama principal porque es aquella en la que los desfases se anulan para energías muy altas, $\delta_+(\infty) = 0$. Así se ilustra mejor que a esas energías deja de haber dispersión. Su valor a bajas energías es $\delta_+(0) = \frac{\pi}{2}$.

Capítulo 3

Estudio de los Estados Ligados a Través de la Dispersión

Sorprendentemente, los estados de dispersión también pueden caracterizar el espectro completo de estados ligados del potencial. Esto tiene una gran ventaja, pues los experimentos de dispersión son más sencillos de realizar y, además, sus soluciones en la región asintótica (solución experimentalmente relevante) son considerablemente más fáciles de resolver. Los estados ligados, en cambio, son más escurridizos al experimento directo; están “escondidos” en una región muy pequeña del espacio y cuesta mucha energía romperlos.

En este capítulo, extenderemos los elementos de la matriz de dispersión a todo el plano complejo para encontrar sus polos. A partir de ellos, seremos capaces de contar el número de estados ligados del potencial (demostrando el teorema de Levinson) y la energía a la que se encuentran. Además, estos polos nos informan sobre el comportamiento de la dispersión en un entorno cercano a ellos, dando lugar a efectos de resonancia. Después, lo aplicaremos a ejemplos concretos, comenzando por el potencial delta como ejemplo ilustrativo y luego con los potenciales transparentes.

3.1. Polos de la Dispersión

Las soluciones de dispersión de la base con la que trabajamos $\psi^{R,L}(x; k)$ son continuas y normalizables tanto en el espacio como en el espectro de energías accesibles, es decir, para todo $k > 0$ en la recta real. Esto conlleva también la continuidad de los coeficientes de dispersión, $b(k)$ y $t(k)$. Sin embargo, es posible encontrar algún polo en las funciones si expandimos su dominio a todo el plano complejo, $k \in \mathbb{C}$.

Como hemos visto al principio del Capítulo 2, si desplazamos k sobre ciertos valores del eje imaginario sobre el plano superior, es decir, $k = i\kappa$, con $\kappa > 0$, las soluciones de dispersión (2.4) en la zona asintótica se convierten en soluciones ligadas (2.5). Esto se debe a que ambas soluciones en la región asintótica son solución de la misma ecuación diferencial homogénea de segundo orden (H_0) y tienen la misma base de funciones exponenciales. Veremos en esta sección que estas soluciones ligadas son de cuadrado integrable y, por ello, físicamente aceptables, para aquellos valores que tengan un polo en los coeficientes de dispersión $b(k)$ y $t(k)$. Esto es porque anulan los coeficientes de las exponenciales reales divergentes de (2.5), dejando así una función normalizable.

Con este proceso, al encontrar los polos del eje imaginario superior, se obtiene el espectro completo de estados ligados de un potencial dado, $e_n = k_n^2 < 0$. A los demás valores de k en el plano complejo

no les corresponderán soluciones físicamente aceptables, pero podrán ser influyentes en la dependencia respecto de k de los coeficientes de dispersión en zonas que sí lo sean, sólo hay que darse cuenta de que un polo condiciona también la función en una región próxima a él.

3.1.1. Estados Ligados

Llamaremos estados de Jost a las soluciones de dispersión del potencial con la forma de única onda plana normalizada en uno de los dos extremos del eje

$$\psi_J^R = e^{ikx}, \quad x \rightarrow +\infty \quad (3.1)$$

$$\psi_J^L = e^{-ikx}, \quad x \rightarrow -\infty$$

Al igual que las funciones de dispersión normal y zurda, las funciones de Jost, $\psi_J^{R,L}$, forman una base de los estados de dispersión. Se construyen a partir de la solución general (2.4), eligiendo $A = 0$, $B = 1$ para ψ_J^L y $F = 1$, $G = 0$ para ψ_J^R . Toman la forma asintótica genérica

$$\psi_J^L = \begin{cases} e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ g_1(k)e^{ikx} + g_2(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.2)$$

$$\psi_J^R = \begin{cases} \tilde{g}_1(k)e^{ikx} + \tilde{g}_2(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.3)$$

Estas funciones nos permiten encontrar los estados ligados. Veámoslo. La propiedad que nos interesa es que los ceros de $g_1(k)$ sobre el eje imaginario del plano superior,

$$g_1(i\kappa_n) = 0, \quad \kappa_n > 0 \quad (3.4)$$

corresponden con estados normalizables en los que las exponenciales no divergen. Estos estados son físicamente aceptables y con energía negativa $e = -\kappa_n^2 < 0$, de modo que se trata de los estados ligados.

A su vez, los ceros de $g_1(k)$ corresponden con polos de las amplitudes de transmisión y reflexión. Para verlo, busquemos una relación entre las amplitudes de dispersión y los coeficientes de Jost. Empezamos por escribir la dispersión normal (2.6) en función de las funciones de Jost

$$\psi^R = \begin{cases} \psi_J^{L*} + b^R(k)\psi_J^L, & x \rightarrow -\infty \\ t(k)\psi_J^R, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.5)$$

deben ser iguales en ambos extremos

$$\psi_J^{L*} + b^R(k)\psi_J^R = t(k)\psi_J^L \quad (3.6)$$

en $x \rightarrow -\infty$ tenemos

$$[t(k) - g_1^*(k) - b^R(k)g_2(k)] e^{-ikx} - [g_2^*(k) - b^R(k)g_1(k)] e^{ikx} = 0 \quad (3.7)$$

que se cumple si

$$\begin{cases} g_1^*(k) + b^R(k)g_2(k) = t(k) \\ g_2^*(k) + g_1(k)b^R(k) = 0 \end{cases} \quad (3.8)$$

aislando $t(k)$ y $b^R(k)$ se tiene una expresión de las amplitudes de dispersión en función de las amplitudes de Jost

$$t(k) = \frac{|g_1|^2 - |g_2|^2}{g_1}, \quad b^R(k) = -\frac{g_2^*}{g_1} \quad (3.9)$$

g_1 y g_2 son generalmente productos de polinomios y funciones exponenciales, es decir, funciones holomorfas (sin polos). Con esto, finalmente comprobamos que, en general, si $t(k)$ y $b^R(k)$ tienen algún polo, este debe coincidir siempre con un cero de $g_1(k)$. En concreto, los estados ligados corresponden a los polos sobre el eje imaginario en el plano complejo superior. Para mayor información sobre el papel de las funciones de Jost en la física, puede consultarse el trabajo de fin de grado de Álvaro Cía Mina [5].

El mismo procedimiento se puede seguir para la dispersión zurda y se obtiene

$$t(k) = \frac{|\tilde{g}_2|^2 - |\tilde{g}_1|^2}{\tilde{g}_2}, \quad b^L(k) = -\frac{\tilde{g}_1^*}{\tilde{g}_2} \quad (3.10)$$

Gracias a que la amplitud de transmisión es la misma en ambas funciones $t^R = t^L \equiv t$, sabemos que los ceros de g_1 son los mismos que los de $\tilde{g}_2$, y podemos sacar factor común $\frac{1}{g_1}$ a la matriz de dispersión

$$S(k) = \frac{1}{g_1} \tilde{S}(k) \quad (3.11)$$

sabiendo que $\frac{1}{g_1}$ almacena todos los polos de $S(k)$. $\tilde{S}(k)$ es una matriz de coeficientes holomorfas. El determinante es

$$\text{Det}[S(k)] = \frac{1}{g_1} \text{Det}[\tilde{S}(k)] \quad (3.12)$$

y puede escribirse según (2.33) en función de los desfases

$$\text{Det}[S(k)] = e^{2i\phi_t} = e^{2i(\delta_0 + \delta_1)} = e^{2i\delta_0} e^{2i\delta_1} \quad (3.13)$$

3.1.2. Resonancias

Hemos visto que los ceros de $g_1(k)$ corresponden con estados físicos cuando $k_n = i\kappa_n$ con $\kappa_n > 0$, pero también puede tener ceros en otras partes del plano complejo. Todos ellos conducen a soluciones de Jost de la ecuación de Schrödinger, (2.2), pero ninguna es físicamente aceptable: si estuviese situado en el eje imaginario inferior, las funciones (3.2) y (3.3) no serían normalizables, y si estuviese en cualquier otro punto del plano complejo, la energía tendría una componente imaginaria. Aún así, estos puntos pueden tener un gran efecto sobre las soluciones de dispersión. Como corresponden con los polos de $t(k)$ y $b(k)$, sus valores en un entorno cercano al polo sufrirán cambios repentinos. Si estos quedan cerca de la recta real, tendrá un efecto apreciable en la dispersión, que se manifestará en modo de resonancias de las amplitudes y los desfases.

Cada potencial es un caso distinto, pero de forma general encontraremos dos tipos de polos no físicos. Consideremos que $k_0 = \alpha_+ + i\gamma_+$ es un polo de $t(k)$ y $b(k)$, donde $\alpha_+, \gamma_+ \in \mathbb{R}$ y $|\gamma_+| \sim 0$, entonces:

1. Si $\alpha_+ = 0, \gamma_+ < 0$: *estado virtual*.

En general, conllevan un pico de resonancia de $R(k)$ centrado en $k = 0$. Si se incrementase un poco la magnitud del potencial atractivo, el estado virtual desaparecería y se convertiría en un estado ligado, con $\gamma_+ > 0$.

2. Si $\alpha_+ > 0, \gamma_+ < 0$: *estado de resonancia*.

Gran magnitud en la sección más cercana al polo. Generan una resonancia en la dispersión; un pico aproximadamente centrado sobre $k = \gamma_+$.

3.2. Teorema de Levinson

Gracias a la relación que hemos encontrado entre polos y estados ligados, el problema de encontrar el espectro completo de estados ligados de $v(x)$ se reduce a encontrar todos los polos de $S(k)$ sobre el eje imaginario en el plano superior. Tal recuento puede hacerse resolviendo las raíces de $g_1(k)$, pero es posible que nos encontremos con expresiones analíticas tan complicadas que seamos incapaces de resolver. Como alternativa, podemos buscar otra forma de realizar el recuento que nos lleve a un resultado de expresión más general. Lo haremos mediante integrales de camino cerrado alrededor de los polos, y nos conducirá al teorema de Levinson, que relaciona el número de estados ligados N con los desfases de la dispersión en el cero y en el infinito.

La idea es aprovecharse de los siguientes tres resultados.

- **Teorema del Residuo:** la integral de toda función meromorfa $f(k)$, analítica salvo en un conjunto numerable de puntos $P(f)$, a través de un camino cerrado γ sólo depende de los residuos de los polos encerrados por el camino $\{k_n\}_{n=1,\dots,N} \subset P(f)$ según la siguiente expresión

$$\oint_{\gamma} f(k) dk = 2\pi i \sum_{n=1}^N \text{Res}[f(k)_n] \quad (3.14)$$

- **Derivada Logarítmica:** Consideremos una función holomorfa $h(k)$ cuyos ceros forman conjunto numerable $P(h)$. Entonces, sea $\frac{d}{dk} \log(h(k)) = \frac{h'(k)}{h(k)}$ la derivada logarítmica de $h(k)$, y $k_n \in P(h)$, puede demostrarse que

1. Los polos de $\frac{h'(k)}{h(k)}$ son los ceros de $h(k)$.
2. Todos los polos de $\frac{h'(k)}{h(k)}$ son polos simples.
3. El residuo de $\frac{h'(k_n)}{h(k_n)}$ es igual al orden de $h(k_n)$:

$$\text{Res}\left[\frac{h'(k_n)}{h(k_n)}\right] = \text{Orden}[h(k_n)] \quad (3.15)$$

Con estos dos resultados, podemos enunciar el principio del argumento, que es un método para transformar la suma de residuos (3.14) en un recuento de ceros.

- **Principio del Argumento:** El teorema del residuo, aplicado para $\frac{h'}{h}$ e integrado sobre cualquier curva cerrada γ con N polos en su interior $\{k_n\}_{n=1,\dots,N}$, es

$$\oint_{\gamma} d \log(h) = 2\pi i \sum_{n=1}^N \text{Res}\left[\frac{h'(k_n)}{h(k_n)}\right] = 2\pi i \sum_{n=1}^N \text{Orden}[h(k_n)] = 2\pi i M \quad (3.16)$$

donde M es el recuento del orden de los ceros de $h(k)$, por la relación (3.15).

Por otra parte, la integral puede reescribirse en función del argumento de h

$$\oint_{\gamma} d \log(h) = i \oint_{\gamma} d \arg(h) \quad (3.17)$$

porque la integral dependiente del módulo se anula (al ser igual en los puntos inicial y final). Entonces, tenemos la expresión final

$$\oint_{\gamma} d \arg(h) = 2\pi \sum_{n=1}^N \text{Orden}[h(k_n)] = 2\pi N \quad (3.18)$$

que relaciona el argumento de una función con sus ceros, N .

Finalmente, se toma h como el inverso del desfase, y se integra sobre una semicircunferencia que abarque todo el semiplano complejo superior. Se obtiene la expresión definitiva del teorema de Levinson en una dimensión

$$N = \frac{\phi_t(0) - \phi_t(\infty)}{\pi} - \frac{b(0)}{2} \quad (3.19)$$

Si el potencial es par $v(x) = v(-x)$, los estados propios del Hamiltoniano tienen la paridad bien definida, tanto los ligados como los dispersos. Entonces, sustituyendo (2.41) y (2.40), puede escribirse el teorema de Levinson por paridades

$$N_+ = \frac{\delta_+(0) - \delta_+(\infty)}{\pi} - \frac{b(0)}{2} \quad (3.20)$$

$$N_- = \frac{\delta_-(0) - \delta_-(\infty)}{\pi}$$

donde N_+ y N_- son el número de estados ligados con cada paridad, y δ_+ y δ_- los desfases por paridades definidos en (2.40) y (2.41). En la sección 2.3.2 hemos visto que la base por paridades es el equivalente unidimensional a la base en ondas parciales en tres dimensiones, donde la dispersión se produce independientemente sobre cada momento angular. De forma similar, la ecuación (3.20) puede equipararse al teorema de Levinson tridimensional escrito en ondas parciales

$$N_l = \frac{\delta_l(0) - \delta_l(\infty)}{\pi} \quad (3.21)$$

3.2.1. Demostración Alternativa

Existe una demostración alternativa que es prácticamente heurística, porque parte de una hipótesis que no está demostrada, pero permite entender la relación que hay entre el espacio de estados de dispersión y el de estados ligados.

Se parte de la resolución espectral de los operadores Hamiltonianos completo, H , y libre, H_0 . La resolución espectral es una expansión de una matriz, por ejemplo M , en los espacios asociados a sus autovalores, m , a partir de los proyectores de cada espacio, $P_m = |m\rangle\langle m|$:

$$M = \sum_m m P_m \quad (3.22)$$

Si el espacio completo de autovalores de la matriz comprende todo el espacio de estados, entonces

$$1 = \sum_m P_m \quad (3.23)$$

y se dice que tiene *resolución de la identidad*.

H y H_0 están definidos en el mismo espacio de Hilbert. Lo que haremos será escribir la resolución espectral de cada uno y asumir que ambos tienen la resolución de la identidad, es decir, que cada uno cubre entero el espacio de Hilbert. H_0 sólo tiene un espectro continuo de estados propios libres, y H puede albergar un espectro discreto de soluciones ligadas, a demás del continuo de soluciones de dispersión

$$1 = \int_0^\infty dP^{(0)}(\mu) \quad (3.24)$$

$$1 = \sum_{j=1}^N P_j + \int_0^\infty dP(\mu), \quad N > 0 \quad (3.25)$$

donde μ recorre todos los estados propios, y hemos supuesto un número finito N de estados ligados. Ahora restamos las dos ecuaciones

$$-\sum_{j=1}^N P_j = \int_0^\infty d(P(\mu) - P^{(0)}(\mu)) \quad (3.26)$$

y tomamos la traza

$$-N = \int_0^\infty Tr[d(P(\mu) - P^{(0)}(\mu))] \quad (3.27)$$

Este ya es el teorema de Levinson, aunque en una forma demasiado general. Es una relación entre el número de estados ligados N y la diferencia de la densidad espectral de dispersión y libre. De alguna manera, se puede interpretar como una conservación del número de estados; como si la densidad espectral que deja de ser libre en el espectro de H (por la presencia del potencial) fuese a parar a la densidad espectral de estados ligados.

La intención es convertir los proyectores en amplitudes de dispersión. Sabemos que los estados libres y dispersos tienen un espectro continuo, indexado por $k > 0$, y doblemente degenerado, cuyos autoestados indicamos como $|k\rangle$. Para dar cuenta de la degeneración, expandimos el rango de k a toda la recta real. Si los valores positivos representan la solución normal $|k\rangle \equiv \psi^R(x; k)$, los valores negativos sencillamente representan la solución zurda, $|-k\rangle \equiv \psi^L(x; k)$. Escribamos la densidad espectral en función del número de ondas

$$dP = \frac{dP}{dk} dk = |k\rangle\langle k| dk \quad (3.28)$$

i tomamos la traza usando la base de posiciones, escribiendo $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\langle k|x\rangle$

$$2\pi Tr[\frac{dP}{dk}] = \int \langle x|\frac{dP}{dk}|x\rangle dx = \int \langle x|k\rangle\langle k|x\rangle dx = \int |\psi_k(x)|^2 dx \quad (3.29)$$

Los estados libres son exponenciales complejas en todo el espacio, $\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$, así que

$$2\pi Tr[\frac{dP^{(0)}}{dk}] = \int e^{ikx}e^{-ikx} dx = \int dx \quad (3.30)$$

Con estas dos últimas ecuaciones se escribe el teorema de Levinson en función de las soluciones de dispersión, $\psi_k(x)$

$$-2\pi N = \int_{-\infty}^\infty dk \int_{-\infty}^\infty (|\psi_k(x)|^2 - 1) dx \quad (3.31)$$

Definimos ahora la densidad espectral relativa como

$$\rho_{\text{rel}}(k) = \int (|\psi_k(x)|^2 - 1) dx \quad (3.32)$$

Debemos relacionar la densidad espectral relativa con los datos de dispersión. Para calcularla, no nos basta con la expresión asintótica de $\psi_k(x)$ porque la integral recorre todo el espacio, incluida la región de interacción. También recordamos que $\int_{-\infty}^\infty |\psi_k(x)|^2 \neq 1$ dado que los estados propios libres no son normalizables. La respuesta se encuentra calculando la derivada espacial del siguiente Wronskiano: $\frac{d}{dx}W_{\psi, \dot{\psi}}(x) = \psi''\dot{\psi} - \psi\dot{\psi}''$, donde el punto significa derivada respecto de k . Las dobles derivadas espaciales se pueden escribir en términos de primeras derivadas a partir de la ecuación de Scrödinger (2.2), para el caso de $\dot{\psi}''$ derivándola antes respecto de k . Entonces

$$\psi'' = v\psi - k^2\psi, \quad \dot{\psi}'' = v\dot{\psi} - 2k\psi - k^2\dot{\psi} \quad (3.33)$$

y el Wronskiano se escribe como

$$\frac{d}{dx}W_{\psi, \dot{\psi}} = 2k\dot{\psi}^2 = 2k(Re(\dot{\psi})^2 - Im(\dot{\psi})^2) \quad (3.34)$$

Si se calcula en Wronskiano sólo de la parte real $\phi \equiv \text{Re}(\psi)$ se tiene que $\frac{d}{dx}W_{\phi,\phi} = 2k\phi^2$. Integrándolo sobre un intervalo $x \in [-L, +L]$ se tiene

$$W_{\phi,\phi}(x)|_{-L}^{+L} = 2k \int_{-L}^{+L} \phi^2(x) dx \quad (3.35)$$

y una expresión análoga si se toma la parte imaginaria $\chi \equiv \text{Im}(\psi)$

$$W_{\chi,\chi}(x)|_{-L}^{+L} = 2k \int_{-L}^{+L} \chi^2(x) dx \quad (3.36)$$

Finalmente, sumando las dos ecuaciones,

$$W_{\phi,\phi}(x) + W_{\chi,\chi}(x)|_{-L}^{+L} = 2k \int_{-L}^{+L} |\psi|^2(x) dx \quad (3.37)$$

Claramente, cuando L sea suficientemente grande, la parte izquierda de la ecuación estará en la región asintótica y se escribirá en términos de los coeficientes de dispersión, que por conveniencia escribimos en su forma polar

$$b(k) = |b(k)|e^{i\phi_r}, \quad t(k) = |t(k)|e^{i\phi_t} \quad (3.38)$$

La resolución es larga pero directa, y cuando se lleva al límite $L \rightarrow \infty$ y se añade al teorema de Levinson, se obtiene su expresión en términos de los coeficientes de dispersión

$$-2\pi N = \int_{-\infty}^{\infty} [\dot{\phi}_t + |b(k)|^2(\dot{\phi}_r - \dot{\phi}_t) + \pi b(0)\delta(k)] dk \quad (3.39)$$

Podemos dividir la integral en la contribución de estados normales (de 0 a $+\infty$) y zurdos (de $-\infty$ a 0). De la sección (2.2.2) sabemos que $|b^R| = |b^L|$ y que $(\dot{\phi}_t - \dot{\phi}_r^+) + (\dot{\phi}_t - \dot{\phi}_r^-) = 0$ de modo que el término del medio se anula y resulta

$$-2\pi N = \int_0^{\infty} [2\dot{\phi}_t(k) + \pi b(0)\delta(k)] dk \quad (3.40)$$

Integrando, finalmente, se obtiene el teorema de Levinson en una dimensión

$$N = \frac{\phi_t(0) - \phi_t(\infty)}{\pi} - \frac{b(0)}{2} \quad (3.41)$$

3.3. Ejemplos

3.3.1. Potencial Delta

Volvemos al potencial delta, que es el problema de dispersión más esencial

$$v(x) = g\delta(x) \quad (3.42)$$

Recordamos que el desfase de la onda impar era nulo. La dispersión era unimodal en onda par con el siguiente desfase

$$e^{2i\delta_+} = -\frac{\phi_+(-k)}{\phi_+(k)}, \quad \phi_+(k) = 2ik - g \quad (3.43)$$

Contiene un polo simple en $k_p = -\frac{g}{2}i$ (ver Figura 3.1). Cuando la delta es atractiva ($g < 0$), el polo está en el plano superior y representa el único estado ligado del sistema con energía $e = -\frac{g^2}{2}$. Este estado existe para cualquier valor $g < 0$, pues recordemos que los potenciales atractivos unidimensionales siempre tienen al menos un estado ligado. Además, si g es suficientemente pequeña, la cercanía del

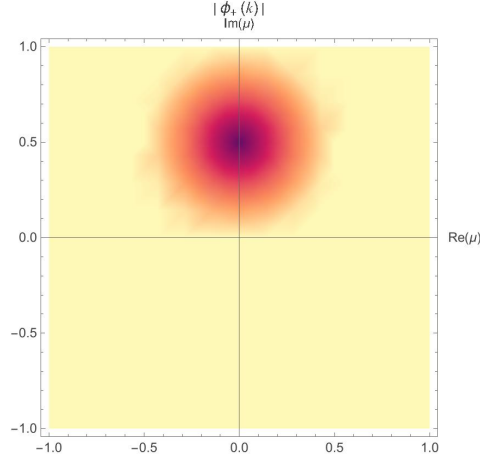


Figura 3.1: $|\phi_+(k)|$ representado sobre el plano complejo cuando $g = -1$. Código de colores: rojo oscuro ~ 0 , amarillo claro $\sim \infty$.

polo con el eje real genera una resonancia en la dispersión alrededor de $k = 0$. Si la delta es repulsiva ($g > 0$) en vez de atractiva, k_p no representa un estado físico, solo se mantiene el efecto de resonancia para energías bajas.

Los polos también se encuentran en los coeficientes

$$T = \frac{16k^2}{(k + ig/2)(k - ig/2)}, \quad R = \frac{4g^2}{(k + ig/2)(k - ig/2)} \quad (3.44)$$

Independientemente de si la delta es atractiva o repulsiva, ambos comparten los mismos dos polos simples simétricos: $k_1 = \frac{g}{2}i$ y $k_2 = -\frac{g}{2}i$.

En la Figura (3.2) se observa la magnitud de la resonancia cerca de $k = 0$ en función de g . Vemos cómo el sistema pasa rápidamente de la reflexión total a la transmisión total en un intervalo estrecho de energías. El cambio se produce con más brusquedad cuanto más pequeño sea g . En el caso límite $g = 0$ (potencial nulo), T y R intercambian sus valores desde el principio y hay transmisión total incluso en $k = 0$. Los potenciales que no reflejan en el límite de energías bajas se denominan potenciales críticos, y $v(x) = 0$ es uno de ellos.

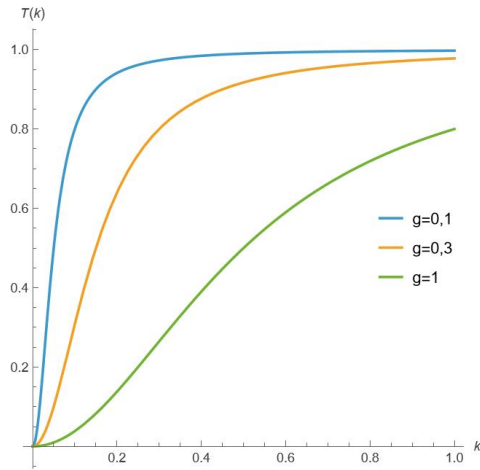


Figura 3.2: Coeficiente de transmisión para distintos valores de g

Comprobamos que el teorema de Levinson (3.20) conduce al mismo número de estados ligados que los polos

$$N_+ = 1, \quad N_- = 0 \quad (3.45)$$

3.3.2. Doble Delta

Tomamos ahora un ejemplo más complejo; dos deltas de igual magnitud, separadas por una distancia $2a$

$$v(x) = B[\delta(x+a) + \delta(x-a)] \quad (3.46)$$

Este ejercicio está recogido en el paper [4] sobre las fuerzas de Casimir en el caso unidimensional. El potencial sigue siendo par, pero esta vez dispersa ambas paridades. Las soluciones fuera de las deltas siguen siendo libres, pero ahora se dividen en tres regiones distintas

$$\psi^R(k) = \begin{cases} e^{ikx} + b(k)e^{-ikx}, & x < -a \\ A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}, & -a < x < a \\ t(k)e^{ikx}, & x > a \end{cases} \quad (3.47)$$

Por continuidad de la función en los puntos a y $-a$, y calculando la discontinuidad de la derivada sobre cada delta, encontramos las amplitudes de dispersión

$$A_1 = \frac{2\mu(2\mu + i\beta)}{\Delta(\mu)}, \quad A_2 = -i \frac{2\mu\beta e^{2i\mu}}{\Delta(\mu)} \quad (3.48)$$

$$t(\mu) = \frac{4\mu^2}{\Delta(\mu)}, \quad b(\mu) = -i \frac{\beta(2\mu + i\beta)e^{-2i\mu} + \beta(2\mu - i\beta)e^{2i\mu}}{\Delta(\mu)}$$

donde $\mu \equiv ka$ y $\beta \equiv Ba$. Los ceros del denominador común $\Delta(\mu)$ para todas las amplitudes

$$\Delta(\mu) = 4\mu^2 + 4i\mu\beta + (e^{4i\mu} - 1)\beta^2 \quad (3.49)$$

se corresponden con los polos de $\text{Det}[S(k)]$.

Esta vez, el desfase impar no es nulo y la dispersión ya no es unimodal:

$$e^{2i\delta_+} = t(\mu) + b(\mu) = \frac{\phi_+(-\mu)}{\phi_+(\mu)}, \quad \text{con} \quad \phi_+(\mu) \equiv \frac{1}{\mu}[\mu + i\beta e^{i\mu} \cos(\mu)] \quad (3.50)$$

$$e^{2i\delta_-} = t(\mu) - b(\mu) = \frac{\phi_-(-\mu)}{\phi_-(\mu)}, \quad \text{con} \quad \phi_-(\mu) \equiv \frac{1}{\mu}[\mu + \beta e^{i\mu} \sin(\mu)] \quad (3.51)$$

El conjunto de los ceros de $\Delta(\mu)$ puede factorizarse en la unión de los ceros de $\phi_+(\mu)$ y los de $\phi_-(\mu)$, gracias a la ecuación

$$\text{Det}[S(k)] = e^{2i(\delta_+ + \delta_-)} = e^{2i\delta_+} e^{2i\delta_-} \quad (3.52)$$

Es decir, los polos de $S(k)$ ocurren por paridades. Entonces, cabe esperar que tanto las resonancias como los estados ligados tengan paridad definida.

Hagamos un estudio de las raíces de cada ecuación $\phi_j(\mu_j) = 0$ separando la parte real e imaginaria: $\mu_j = \alpha_j + i\gamma_j$.

Raíces imaginarias: $\mu_j = i\gamma_j$

La solución para las raíces imaginarias $\mu_j = i\gamma_j$ de (3.50) y (3.51) es

$$-\frac{2}{\beta}\gamma_+ = 1 + e^{-2\gamma_+} \quad (3.53)$$

$$\frac{2}{\beta}\gamma_- = -1 + e^{-2\gamma_-} \quad (3.54)$$

Haciendo un estudio numérico de la primera ecuación, encontramos que no hay raíces si $\beta > \beta_0 \approx 0,278465$; sólo una raíz doble con $\gamma_+ < 0$ si $\beta = \beta_0$; dos raíces simples con $\gamma_+ < 0$ si $0 < \beta < \beta_0$; y sólo una raíz simple con $\gamma_+ > 0$ si $\beta < 0$. En cambio, la segunda ecuación sólo tiene una raíz con $\gamma_- < 0$ si $-1 < \beta < 0$ y con $\gamma_- > 0$ si $\beta \leq -1$.

Consideramos $\gamma_j > 0$ para encontrar los estados ligados. Entonces, hay tres casos:

- Si $-1 < \beta < 0$, sólo hay un estado ligado par con energía $e_+ = -\frac{\gamma_+^2}{a}$.
- Si $\beta < -1$, hay dos estados ligados. Uno es par, con energía $e_+ = -\frac{\gamma_+^2}{a}$, y otro es impar, con energía $e_- = -\frac{\gamma_-^2}{a}$.
- Si $\beta > 0$, no hay estados ligados.

Consideremos ahora los estados virtuales pares $\gamma_+ < 0$. Sabemos que, si están suficientemente cerca del eje real, provocan resonancias en la dispersión para bajas energías, $k \sim 0$. Por eso, consideramos $|\gamma_+| \ll 1$ y calculamos el desarrollo de Taylor de las funciones ϕ_j en un entorno alrededor del estado virtual γ_+ :

$$\phi_+(\mu) = -i\gamma_+^{-1}(1 + \beta + 2\gamma_+)(\mu - i\gamma_+) + O((\mu - i\gamma_+)^2) \quad (3.55)$$

$$\phi_-(\mu) = \gamma_+^{-1}(\beta + 2\gamma_+) + O(\mu - i\gamma_+) \quad (3.56)$$

Recordando las relaciones (3.50) y (3.51) para los desfases, tenemos

$$e^{2i\delta_+} \simeq -\frac{\mu + i\gamma_+}{\mu - i\gamma_+}, \quad e^{2i\delta_-} \simeq 1 \quad (3.57)$$

de modo que δ_+ varía mucho en esa zona, mientras que δ_- permanece prácticamente igual a cero. Entonces, uno obtiene el siguiente coeficiente de transmisión

$$T(\mu) = \cos^2(\delta_+ - \delta_-) \simeq \frac{\mu^2}{\mu^2 + \gamma_+^2} \quad (3.58)$$

Para el límite de bajas energías, $\mu \sim 0$, no hay transmisión; sin embargo, la presencia de los estados virtuales (al igual que la de los estados ligados débiles, ya que también son polos cerca del origen) hace que el coeficiente de transmisión aumente rápidamente a bajas energías $k \sim 0$. Visto desde el punto de vista del coeficiente de reflexión, este tiene un pico de resonancia centrado en $k = 0$, donde obtiene su mayor valor $R(0) = 1$. Resultados similares se obtendrían por el mismo tipo de ceros de ϕ_- .

Este efecto que hemos estudiado es el mismo efecto de resonancia que aparecía sólo para la onda par en el problema de la delta simple. Más allá de esa, la delta no resonaba para ninguna otra energía. En cambio, veremos que la doble delta posee también polos de dispersión complejos $\mu_j = \alpha_j + i\gamma_j$, más allá del eje imaginario, que la harán resonar a distintas energías.

Raíces complejas: $\mu_j = \alpha_j + i\gamma_j$

La solución para las raíces complejas de (3.50) y (3.51) es:

$$\frac{1}{\beta}e^{-\beta} = \frac{\sin(2\alpha_+)}{2\alpha_+}e^{2\alpha_+ \cot(2\alpha_+)}, \quad \gamma_+ = \frac{1}{2} \ln \left[\beta \frac{\sin(2\alpha_+)}{2\alpha_+} \right] \quad (3.59)$$

$$-\frac{1}{\beta}e^{-\beta} = \frac{\sin(2\alpha_-)}{2\alpha_-}e^{2\alpha_- \cot(2\alpha_-)}, \quad \gamma_- = \frac{1}{2} \ln \left[-\beta \frac{\sin(2\alpha_-)}{2\alpha_-} \right] \quad (3.60)$$

Estas ecuaciones tienen un número infinito de raíces complejas, todas situadas en el semiplano inferior complejo. Las desarrollamos de nuevo en serie de Taylor alrededor de las raíces pares $\mu_+ = \alpha_+ + i\gamma_+$

$$\phi_+(\mu) = -\frac{i}{\mu_+} [2\alpha_+ + i(1 + \beta + 2\gamma_+)](\mu - \mu_+) + O((\mu - \mu_+)^2) \quad (3.61)$$

$$\phi_-(\mu) = \frac{1}{\mu_+} [2\alpha_+ + i(\beta + 2\gamma_+)] + O(\mu - \mu_+) \quad (3.62)$$

Si la raíz es cercana a la recta real, es decir, $|\gamma_+| \ll 1$, podemos tomar un valor real $\mu \simeq \alpha_+$ en el desarrollo de Taylor. Entonces, escribiendo $x \equiv \mu - \alpha_+$ los desfases de la dispersión son

$$e^{2i\delta_+} \simeq \frac{-2\alpha_+ + i(1 + \beta + 2\gamma_+)}{2\alpha_+ + i(1 + \beta + 2\gamma_+)} \frac{\mu_+}{\mu_+^*} \frac{x + i\gamma_+}{x - i\gamma_+} \quad (3.63)$$

$$e^{2i\delta_-} \simeq \frac{2\alpha_+ - i(\beta + 2\gamma_+)}{2\alpha_+ + i(\beta + 2\gamma_+)} \frac{\mu_+}{\mu_+^*} \quad (3.64)$$

y entonces, δ_+ varía considerablemente, incrementando una cantidad π al cruzar la región de energía $e \sim (\frac{\alpha_+}{a})^2$ ($\mu \sim \alpha_+$), mientras que δ_- se mantiene prácticamente constante. Estos crecimientos rápidos de los desfases caracterizan las resonancias.

Para los coeficientes de transmisión, la expresión cuando $\mu \sim \alpha_+$ es

$$T(\mu) \simeq \frac{\gamma_+^2}{(\mu - \alpha_+)^2 + \gamma_+} \quad (3.65)$$

de modo que también hay resonancia en la transmisión. Escrito en función de las energías, tomando $e = (\frac{\mu}{a})^2$

$$T(e) \simeq \frac{(\Gamma_+/2)^2}{(e - e_+)^2 + (e_+/2)^2} \quad (3.66)$$

$$e_+ \equiv \left(\frac{\alpha_+}{a}\right)^2, \quad \Gamma_+ \equiv 4\sqrt{e_+} \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\gamma_+}{a}$$

donde e_+ es la energía de resonancia y Γ_+ es la amplitud de resonancia del pico.

Resumiendo, cuando la energía de dispersión es cercana a la energía de una resonancia par $e \sim e_+$, la transmisión crece, el desfase par varía mucho en el intervalo de energías y el impar es casi constante. En cambio, si hacemos el desarrollo a partir de los ceros de ϕ_- , puede comprobarse que una resonancia impar μ_- , tiene el efecto opuesto en los desfases: variación del desfase impar y estabilidad del desfase par.

Encontremos ahora dónde están las resonancias. Si β es suficientemente grande y negativo, las raíces de (3.59) correspondientes a resonancias son aproximadamente

$$\alpha_n \sim \frac{n\pi}{2} \left[1 + \frac{1}{|\beta|} + \frac{1}{|\beta|^2} + \frac{3 - n^2\pi^2}{3|\beta|^3} + \dots \right] \quad (3.67)$$

$$\gamma_n \sim -\frac{n^2\pi^2}{4|\beta|^2} + \dots, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.68)$$

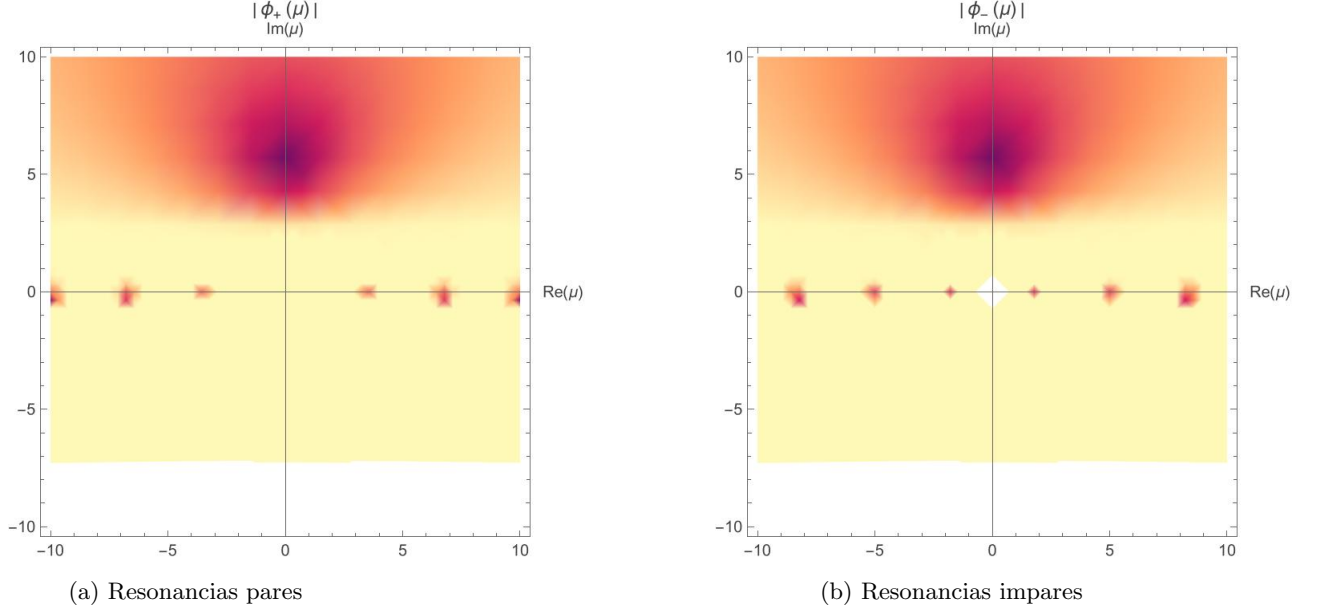


Figura 3.3: Resonancias del potencial doble delta con $\beta = -11$. Código de colores: *rojo oscuro* ~ 0 , *amarillo claro* $\gg 0$.

donde los índices impares corresponden con los ceros de ϕ_+ y los índices pares con los de ϕ_- . En la Figura 3.3 se aprecia su distribución sobre el plano complejo para cada paridad.

Según la ecuación (3.66), vemos que la amplitud de resonancia incrementa progresivamente cuanto más energética sea la resonancia. Esto se ve en la Figura 3.4a: a energías bajas prácticamente sólo hay transmisión para las energías de resonancia, los picos se ensanchan, se solapan unos con otros, y se empieza a transmitir a todas las energías.

Finalmente, en la Figura (3.4b) se han representado los desfases en función de μ para de la dispersión (es decir, $\mu \in \mathbb{R}$). Se observa aquello mencionado anteriormente; en las regiones de resonancia, cuando un desfase tiene un pico (función aproximadamente constante), el otro desfase sufre un gran incremento. Los valores de los desfases en el origen son $\delta_+(0) = \frac{\pi}{2}$ y $\delta_-(0) = \pi$. El incremento neto que sufren los desfases $\frac{1}{\pi}(\delta_+(0) - \delta_+(\infty)) + \frac{1}{2}$ y $\frac{1}{\pi}(\delta_-(0) - \delta_-(\infty))$, validan el teorema de Levinson, pues son el número de estados ligados para cada paridad de la onda.

3.3.3. Potenciales Transparentes

Los potenciales transparentes son un tipo especial de potenciales que no reflejan partículas incidentes, independientemente de su energía:

$$b(k) = 0 \text{ para todo } k \quad (3.69)$$

Es decir, una partícula que incide sobre un potencial transparente lo atraviesa siempre completamente. Dado que cumplen que $|t(k)| = 1$, la dispersión sólo modifica la fase de la onda, no su amplitud

$$t(k) = e^{i\phi_t} \quad (3.70)$$

Un buen ejemplo es el potencial de Pösch-Teller

$$v(x) = -g \operatorname{sech}^2(x), \quad g < 0 \quad (3.71)$$

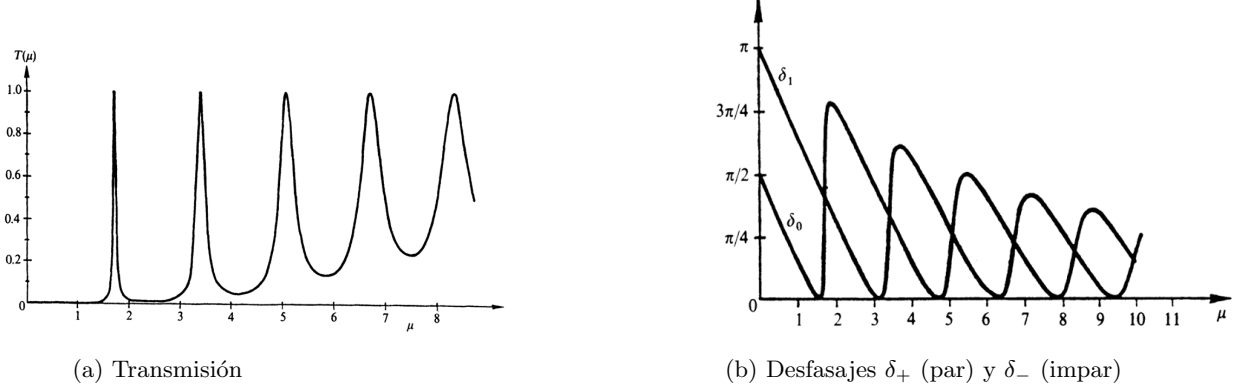


Figura 3.4: Resonancias del potencial delta con $\beta = -11$.

Con un cambio de variable $z = \tanh(x)$ la ecuación de Schrödinger con $v(x)$ se convierte en una ecuación hipergeométrica. Para energías positivas, y reescribiendo la magnitud del potencial de la forma $g = n(n+1)$, se tienen soluciones con el siguiente coeficiente de reflexión

$$R(k) = |b(k)|^2 = \frac{\cos^2(\pi(n+1/2))}{\sinh^2(\pi k) + \cos^2(\pi(n+1/2))} \quad (3.72)$$

este coeficiente se anula para todo k sólo si $n \in \mathbb{N}$. Así, el subgrupo de potenciales de Pöschl-Teller de la forma $v(x) = -n(n+1) \operatorname{sech}^2(x)$ con $n \in \mathbb{N}$ es una familia de potenciales transparentes.

Analicemos el caso $n = 1$ para familiarizarnos con algunas propiedades generales. La ecuación de Schrödinger es

$$\psi''(x) + e\psi(x) = -2 \operatorname{sech}^2(x)\psi(x) \quad (3.73)$$

y tiene la solución de dispersión ($e = k^2 > 0$)

$$\psi_k(x) = \frac{ik - \tanh(x)}{ik + 1} e^{ikx} \quad (3.74)$$

tomando el límite $x \rightarrow \pm\infty$, se tienen las amplitudes de dispersión

$$b(k) = 0, \quad t(k) = \frac{ik - 1}{ik + 1} \quad (3.75)$$

Como $b = 0$, el valor de t está acotado. Por conservación del flujo, $R + T = |b|^2 + |t|^2 = |t|^2 = 1$, t debe ser sólo una fase,

$$t = e^{i\phi} = e^{2i(\delta_0 + \delta_1)} \quad (3.76)$$

Algo que es común en todos los potenciales transparentes es que el potencial es simétrico ($\delta_0 = \delta_+$, $\delta_1 = \delta_-$) y, como $b(k) = 0$, los desfases de cada paridad son iguales

$$\delta(k) \equiv \delta_+(k) = \delta_-(k) = \arctan(1/x) \quad (3.77)$$

Ambos modos se dispersan igual y tenemos un caso de dispersión unimodal el cual el único modo que se dispersa es la onda hacia adelante.

Otro aspecto clave de los potenciales transparentes es el comportamiento a bajas energías. Lo esperado de un potencial genérico es que, conforme se reduce la energía, la reflexión tienda a ser total; sin embargo, claramente este no es el caso de los potenciales transparentes, pues cumplen $b(0) = 0$.

Los potenciales que cumplen esta característica se denominan *críticos*, y su comportamiento especial está ligado a la presencia de una resonancia en $k = 0$.

Escribamos el coeficiente de dispersión hacia adelante

$$T(k) = |t(k)| = \frac{(k^2 - 1)^2 + 4k^2}{k^2 + 1} \quad (3.78)$$

Tiene dos polos: uno en $k = i$ y otro en $k = -i$. El primero es también polo de $t(k)$ y nos indica su único estado ligado, $e = -1$. El segundo corresponde con un estado virtual, es decir, una resonancia centrada en $k = 0$.

Método de Factorización

Usaremos un método para encontrar familias de potenciales transparentes. A partir de un Hamiltoniano dado y de una solución suya, construiremos una familia de Hamiltonianos que compartirán algunas propiedades en la dispersión. Para una discusión más profunda sobre la heurística del teorema de Levinson, puede consultarse el paper [1].

Partimos de un potencial inicial, construimos su Hamiltoniano y escogemos una solución

$$(H - E_0)\Phi_0 = 0 \quad (3.79)$$

Φ_0 debe ser una solución matemática del Hamiltoniano, pero no necesariamente físicamente aceptable. La escribimos como una función exponencial

$$\Phi_0 = e^{-W(x)} \quad (3.80)$$

$W(x)$ recibe el nombre de *superpotencial*. Construimos el operador A con el que se factorizará el Hamiltoniano (debe satisfacer que $A\Phi_0 = 0$)

$$A \equiv \Phi_0 D \Phi_0^{-1} = D + W'(x) \quad (3.81)$$

donde $D \equiv \frac{d^2}{dx^2}$ y $D^\dagger = -D$. Entonces, el Hamiltoniano se puede factorizar de la forma

$$H - E_0 = A^\dagger A \quad (3.82)$$

El potencial puede aislarse de (3.82)

$$v(x) = W'^2(x) - W''(x) + E_0 \quad (3.83)$$

Para cada factorización, puede definirse un Hamiltoniano asociado de la forma

$$\hat{H} - E_0 = A A^\dagger \quad (3.84)$$

con el mismo espectro de energías de H

$$(H - E_n)\Phi_n = 0 \rightarrow (\hat{H} - E_n)\Psi_n = 0 \quad (3.85)$$

y soluciones similares salvo una transformación lineal general:

$$\Psi_n = A\Phi_n \quad (3.86)$$

El potencial del Hamiltoniano asociado puede aislarse de la expresión (3.84)

$$\hat{v}(x) = W'^2(x) + W''(x) \quad (3.87)$$

El motivo por el que este método preserva ciertas propiedades de las soluciones originales es precisamente porque la transformación es lineal: si partimos de unas soluciones con ciertos coeficientes de dispersión nulos, al aplicar A , se preservarán. Empleando de nuevo el método sobre $\hat{H}$, se obtendrá otro potencial $\hat{v}$, cuyas soluciones mantienen los mismos ceros, e iterando así el procedimiento, se obtiene una familia entera de potenciales con dichos ceros. Aplicado al caso de los potenciales transparentes, el método asegura que las soluciones mantienen $b(k)$ nulo.

Familias de potenciales transparentes

Pongamos en uso el método de factorización y encontremos la familia de potenciales transparentes de Pöschl-Teller.

Tomemos el potencial nulo $v(x) = 0$; el potencial transparente por excelencia. Factoricemos el Hamiltoniano a partir de las soluciones de energía negativa $e_+ = -\kappa^2 < 0$ de la forma

$$\Phi_0 = \cosh(\kappa x) \quad (3.88)$$

Esta solución no es física (porque diverge), pero esto es indiferente a la hora de factorizar el Hamiltoniano. Su superpotencial es

$$W(x) = -\ln(\cosh(\kappa x)) \quad (3.89)$$

y el operador A es

$$A = D + W'(x) = D - \kappa \tanh(\kappa x) \quad (3.90)$$

Por simplicidad, escogemos $\kappa = 1 \implies e = -1$.

El Hamiltoniano asociado

$$H_1 = AA^\dagger - 1 = -D^2 - 2\text{sech}^2(x) \quad (3.91)$$

y el potencial asociado

$$v_1(x) = -2\text{sech}^2(x) \quad (3.92)$$

corresponden con el potencial de Pöschl-Teller transparente para $n = 2$, analizado anteriormente. Sus soluciones de dispersión $e = k^2 > 0$ se calculan a partir de las ondas libres $\Phi(x; k) = e^{ikx}$

$$\Psi_1(x; k) = A\Phi(x; k) = (D - \tanh(x))e^{ikx} \quad (3.93)$$

Analicemos el límite a la región asintótica, $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} (\tanh(x)) = \pm 1$,

$$\Psi_1(x; k) = \begin{cases} (ik + 1)e^{ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ (ik - 1)e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.94)$$

$\Psi_1(x; k)$ claramente no tiene onda reflejada y preserva la transparencia de e^{ikx} . Los coeficientes de dispersión son

$$b(k) = 0, \quad t(k) = \frac{ik - 1}{ik + 1} \quad (3.95)$$

Como la dispersión va sólo a través del canal transmitido, es unimodal, y la transmisión debe ser sólo un factor de fase. En efecto, un potencial transparente cumple que sus dos modos propios se dispersan igual

$$\delta(k) \equiv \delta_+(k) = \delta_-(k) = \arctan(1/k) \quad (3.96)$$

que recorre el intervalo $\delta(k) \in [\delta(0) = \frac{\pi}{2}, \delta(\infty) = 0]$.

El único estado ligado de (3.91),

$$\Psi(x) = \text{sech}(x) \quad (3.97)$$

es el que usaremos para factorizar de nuevo el Hamiltoniano. Iterando el procedimiento se obtiene la familia completa, escogiendo cada vez una solución ligada para factorizar el Hamiltoniano.

En la iteración l -ésima, $W'_l(x) = -l \tanh(x)$, y el potencial

$$v_l(x) = -l(l+1)\text{sech}^2(x) \quad (3.98)$$

es la expresión de la familia de potenciales de Pöschl-Teller transparentes. Resulta curioso que el factor de magnitud $l(l+1)$ siga la misma sucesión que los valores del momento angular. Esto hace pensar que tal vez esta familia de potenciales transparentes comparta alguna propiedad con los vectores axiales en mecánica cuántica.

Las soluciones de dispersión son

$$\Psi_l(x; k) = A_l A_{l-1} \dots A_1 e^{ikx} = (D - l \tanh(x))(D - (l-1) \tanh(x)) \dots (D - \tanh(x)) e^{ikx} \quad (3.99)$$

Todos los potenciales de la familia siguen siendo transparentes. Las soluciones cumplen $b_l(k) = 0$ para todo k y la amplitud transmitida es una fase pura que factoriza como

$$t(k) = \frac{(ik-l)(ik-(l-1)) \dots (ik-2)(ik-1)}{(ik+l)(ik+(l-1)) \dots (ik+2)(ik+1)} \quad (3.100)$$

con polos en $k = mi$ y ceros en $k = -mi$ para $m = 1, 2, \dots, l$. Al igual que en (3.75), los polos pertenecen al plano complejo superior e indican que $v_l(x)$ tiene l estados ligados. Los ceros de $t(k)$ son a su vez polos de su conjugado $t^*(k)$. Por consiguiente, también lo son de $T(k)$. Como están en el eje imaginario del plano inferior, causan una resonancia para $T(k)$ en la dispersión a bajas energías $k \sim 0$.

Los desfases son aditivos en cada iteración

$$\delta(k) = \sum_{m=1}^l \arctan(m/k) \quad (3.101)$$

En el límite $k \rightarrow \infty$ tienen el comportamiento general $\delta(\infty) = 0$, es decir, desaparece la dispersión. Para bajas energías, el desfase es de $\delta(0) = \frac{\pi}{2}l$.

Para terminar, comprobemos ahora el teorema de Levinson

$$N_{\pm} = \frac{\delta(0) - \delta(\infty)}{\pi} = \frac{l}{2} \quad (3.102)$$

Por (2.40) y (2.41), $\delta = 2\phi_t$, de modo que

$$N = l \quad (3.103)$$

Capítulo 4

Conclusiones

En este trabajo se ha comprobado que, gracias al teorema de Levinson, o al debido estudio de los polos de la dispersión, es posible obtener el espectro de estados ligados de un potencial. Con estas mismas herramientas, también se ha podido caracterizar mejor sus propiedades de dispersión. Estos métodos no solo han probado ser útiles, también han sido una forma muy bella de estudiar las soluciones del espacio de Hilbert de forma unificada a partir de una sola expresión: la de dispersión.

Se ha usado análisis complejo para expresar los polos de las funciones meromorfas como ceros de funciones holomorfas, a partir de las funciones de Jost. Partiendo de este resultado, se han empleado resultados de integración de funciones complejas, como el teorema del residuo, para hacer un recuento del número de polos dentro de un contorno complejo; el teorema de Levinson.

Se ha estudiado la dispersión en los regímenes de altas y bajas energías. Se ha encontrado que, en general, la transmisión es nula para bajas energías y total para energías altas. También se ha encontrado una excepción: los potenciales críticos, que transmiten completamente para cualquier energía. De estos potenciales, se ha encontrado que son todos familiares comunes al potencial nulo $v(x)$, que es el potencial transparente por excelencia.

También nos hemos encontrado con un fenómeno muy importante en la física: las resonancias de dispersión. Este fenómeno que hemos caracterizado es fundamental en todo experimento de dispersión, y su estudio se usa para comprender la composición y el comportamiento de la materia a nivel subatómico.

Para un análisis más amplio de la dispersión, se puede aplicar sobre la teoría cuántica de campos el estudio llevado a cabo en este trabajo. Este camino permite ahondar más en los fenómenos de dispersión de los campos cuantizados y da lugar al efecto Casimir.

4.1. Reflexiones Particulares

Dado por terminado este trabajo, me gustaría exponer una reflexión rápida sobre el carácter tan especial de la teoría cuántica y hablar un poco de la indeterminación inherente de las magnitudes físicas.

La física cuántica tiene una aparente paradoja: ¿cómo puede ser que el mismo sistema, en las mismas condiciones, obtenga distintos resultados? Por ejemplo, en nuestro experimento de dispersión, no se puede decir a priori si la partícula saldrá reflejada o transmitida.

¿En qué punto de la dinámica de una partícula cuántica ocurre la paradoja? Según mi opinión,

el momento en que colapsa una función de onda y se proyecta sobre un único estado es un punto conceptualmente débil. Imaginemos que la partícula era realmente una onda. Entonces, no hay problema alguno, arbitrariedad ninguna, la evolución es única; aquella de la onda. En cambio, cuando se proyecta el estado, se rompe la función de onda, se transforma y, además, de forma relativamente arbitraria, desconocida a priori. Ocurre un salto, una discontinuidad de la función en el tiempo. ¿Qué física describe esta discontinuidad de proyección del estado?

Ahora bien, el problema puede venir de antes del colapso. En realidad, el hecho de que la onda de materia se interprete como una onda de probabilidad ya nos avanza lo inevitable: la incertidumbre. El significado completo de la onda, que sigue una evolución determinista, es precisamente definir la indeterminación en la dinámica de la materia.

Volviendo al experimento de dispersión, la dicotomía entre las dos trayectorias es un ejemplo claro de la naturaleza ondulatoria de la materia. En nuestro caso, aun partiendo exactamente del mismo sistema y bajo las mismas condiciones, dos partículas pueden tomar caminos distintos. Descubrimos que hay ciertas cosas que no se pueden saber a priori con certeza y que existen preguntas sin respuesta. Esta incertidumbre causa cierto mal cuerpo cuando uno busca conocer el motivo de los sucesos en nuestro universo: ¿por qué la partícula se refleja en lugar de transmitirse? Esta pregunta deja un vacío en nuestro conocimiento que no somos capaces de llenar. Y, ¿cómo es que puede formularse una pregunta sin respuesta? ¿no es ese el fin de toda lógica? Quizás la teoría esté aún incompleta, o quizás nuestras preguntas no sean buenas. Tal vez estemos confundidos y algunos conceptos que tenemos asumidos carezcan en realidad de sentido.

Bibliografía

- [1] G. Barton. “Levinson’s theorem in one dimension:heuristics”. En: *The Institute of Physics* (1984).
- [2] Luis J. Boya. “Quantum-mechanical catteringinonedimension”. En: *Rivista del Nuovocimento* (2008).
- [3] A. Galindo y P. Pascual. *Quantum Mechanics I*. Springer-Verlag, 1990.
- [4] J. Mateos Guilarte J.M. Muñoz Castañeda y A. Moreno Mosquera. “Quantum vacuum energies and Casimir forces between transparent δ -function plates”. En: *Physical Review* (2013).
- [5] Álvaro Cía Mina. *Soluciones analíticas de ecuaciones en derivadas parciales en interés en física*. Universidad de Valladolid, 2020.