

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

UNIDAD PROFESIONAL DE INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA AVANZADA

CONSTRUCCIÓN DE ESTADOS LIGADOS
EN EL CONTINUO EN SOCIOS
SUPERSIMÉTRICOS DE POTENCIALES
TRUNCADOS DE OSCILADOR
ARMÓNICO.

TESIS PRESENTADA POR LEONARDO JOSÉ LÓPEZ MEJÍA
PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRÍA EN TECNOLOGÍA AVANZADA

2020

Línea de investigación en fenómenos electromagnéticos y cuánticos

Agradecimientos

Índice general

Agradecimientos	2
1. Introducción	5
1.1. Resumen	5
1.2. Estados ligados en el continuo	5
1.3. Potenciales de von Neumann Wigner	8
1.3.1. Método de von Neumann Wigner	8
2. Transformación de Darboux	13
2.1. Esquema general	13
2.1.1. Ejemplo: Oscilador armónico	15
2.2. Transformación de Darboux de orden superior	17
2.3. Transformación de Darboux degenerada	20
3. Potenciales de corto alcance	23
3.0.1. Estados ligados	24
3.0.2. Estados de dispersión	26
4. Potenciales de corto alcance Darboux - deformados	27
4.1. Problema de partícula libre	27
4.2. Potenciales de corto alcance Darboux - deformados	30
4.2.1. Comportamiento del sistema deformado en el origen	32
4.2.2. Potencial radial Darboux - deformado	39
4.2.3. Estados ligados	39
4.2.4. Espectro de dispersión	40

4.2.5. Estado ligado en el continuo	41
4.2.6. Perturbación delta	44
4.3. Pozo radial	47
4.3.1. Estados ligados	47
4.3.2. Estados de dispersión.	48
4.3.3. Sistema deformado	49
4.4. Oscilador armónico truncado	51
4.4.1. Estados ligados	52
4.4.2. Estados de dispersión	52
4.4.3. Oscilador armónico truncado deformado	53
4.5. Deformación parcial	57
5. Resonancias en mecánica cuántica	60
5.1. Corrimiento de fase	60
6. Conclusiones	61
Bibliografía	62

Capítulo 1

Introducción

1.1. Resumen

1.2. Estados ligados en el continuo

Para entender el interés por construir estados ligados en el continuo, empezaremos por establecer la diferencia entre estados ligados y estados de dispersión desde un punto de un sistema mecánico. En mecánica clásica, el movimiento de una partícula con masa m sometido a un potencial V puede ser analizado en términos de la energía mecánica del sistema

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V, \quad (1.1)$$

donde (1.1) se puede escribir a su vez en términos de la velocidad de la partícula en la forma

$$v = \sqrt{\frac{2(E - V)}{m}},$$

lo cual permite observar que para el caso $E < V$, el término dentro de la raíz es negativa y la velocidad puramente imaginaria, lo cual no tiene significado físico. Como consecuencia, existirán zonas "prohibidas" en el espacio donde el cuerpo no podrá desplazarse. Tenemos entonces tres casos principales para el desplazamiento de la partícula (ver figura 1.2), distinguibles en términos de los puntos donde $V(x_r) = E$.

Los puntos x_r son conocidos como puntos de retorno, ya que definen el momento donde $v = 0$ y el movimiento cambia de dirección.

El primer caso es aquel donde la partícula se encuentra en una región acotada por dos puntos de retorno clásico, por lo que sólo podrá desplazarse en una zona finita del espacio, es decir, la partícula estará confinada (E_1, E_2) .

Si la partícula se encuentra en una región acotada por un sólo punto de retorno, esto quiere decir que aunque el movimiento de la partícula está restringido, la región donde puede desplazarse no es finita y por lo tanto no hay confinamiento (E_3) .

Finalmente, si la energía de la partícula es siempre mayor al potencial, ésta podrá desplazarse por todo el espacio, sólo experimentando cambios en su velocidad debido a variaciones en su energía cinética (E_4) .

Podemos concluir entonces que para tener confinamiento en mecánica clásica es una condición necesaria y suficiente que la partícula se encuentre en una región acotada por dos puntos de retorno clásico. A continuación veremos como esta condición ya no es suficiente a la hora de hablar de confinamiento en mecánica cuántica.

En mecánica cuántica, la ley dinámica que describe el comportamiento de un sistema es la ecuación de Schrödinger, la cual en su representación de coordenadas es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (1.2)$$

la cual puede ser vista como un análogo de la ecuación (1.1), en términos de operadores actuando sobre una función ψ , que permite obtener la densidades de probabilidad a través de su módulo al cuadrado, dándole el carácter predictivo a la teoría. Por lo tanto, la siguiente condición a la frontera se debe satisfacer

$$\int_{\mathbb{R}} |\Psi|^2 d^3x$$

Para resolver (1.2), proponemos que la función de onda Ψ sea de la forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$$

por lo que al dividir ambos lados de (1.2) entre Ψ se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) = i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial t}.$$

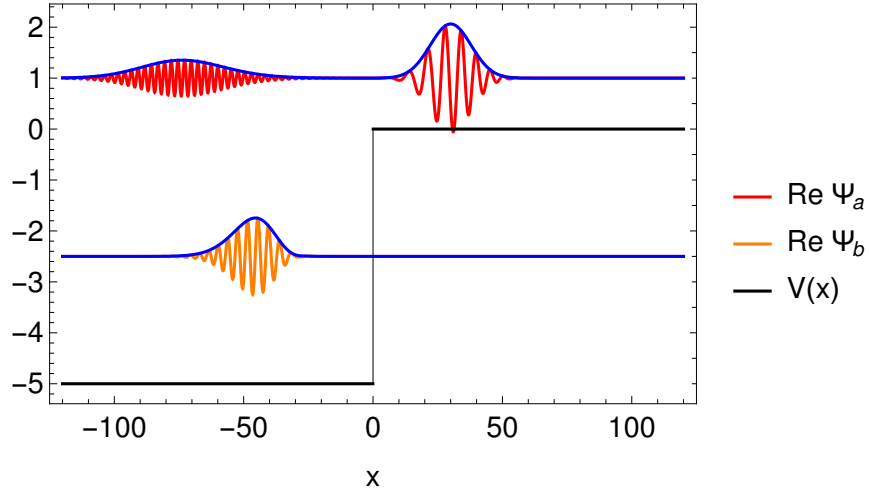


Figura 1.1: Paquete de ondas dispersado por una barrera de potencial $V(x)$. Si la energía se encuentra por debajo del umbral, la totalidad del paquete será reflejada (Ψ_b), en caso contrario, sólo parte del paquete será transmitida (Ψ_a).

Como ambos lados de esta ecuación dependen de una sola variable, ésta se puede desacoplar igualando cada lado a una constante E

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

$$\frac{d\phi}{dt} = -i \frac{E}{\hbar} \phi$$

por lo que el problema se reduce a resolver la primer ecuación para una función $V(x)$ específica.

Finalmente, debido a que se debe satisfacer de alguna manera la condición (1.2), las soluciones a la ecuación de Schrödinger con significado físico son evidentemente las funciones de cuadrado integrable y las funciones acotadas, ya que aunque no cumplen directamente con la condición a la frontera, se pueden usar para construir un paquete de ondas que si la satisface (ver figura 1.1).

Este resultado permite establecer la diferencia clave entre un sistema gobernado por la mecánica cuántica con respecto al caso de un sistema clásico sometido al mismo potencial, en este caso ilustrado por 1.2. Debido a la naturaleza estadística de la

función de onda, en un sistema cuántico existirá la posibilidad de que la partícula se encuentre en una zona prohibida clásicamente, lo que se conoce como efecto túnel. Sin embargo, en el caso de las funciones de cuadrado integrable, llamadas estados ligados, seguirá siendo posible el confinamiento, en este caso, de la función de onda. Por otro lado, para el caso de un ente cuántico descrito por una función acotada, llamado estado de dispersión, este podrá ser reflejado por el potencial a pesar de que su energía sea mayor a la del potencial. La probabilidad de que esto ocurra esta dada por los coeficientes de transmisión y reflexión.

Podemos concluir entonces debido al efecto túnel, en un sistema cuántico no es suficiente la existencia de dos puntos de retorno clásico para que exista confinamiento, si no que además se debe garantizar que las barreras de potencial a las que este sometida la partícula sean de ancho infinito, es decir

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) > E$$

Sin embargo, el hecho de que una función de onda pueda ser reflejada por el potencial sugiere que se puede construir un potencial cuyo efecto sobre la transmisión y reflexión de la función de onda sea tal que esta se pueda confinar a pesar de que su energía no cumpla con (1.2). Estos estados fueron propuestos por von Neumann y Wigner en 1939, siendo llamados estados ligados en el continuo debido a que son funciones de cuadrado integrable con un valor de la energía convencionalmente asociada al espectro de dispersión, el cual es continuo. En la siguiente subsección se desarrollará el método usado para concebir estos peculiares estados.

1.3. Potenciales de von Neumann Wigner

1.3.1. Método de von Neumann Wigner

El método de von Neumann - Wigner se basa en ver un problema de la mecánica cuántica de una manera diferente a la habitual. Mediante la ecuación de Schrödinger radial con momento angular cero con unidades adecuadas

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\psi + V(r)\psi = E\psi$$

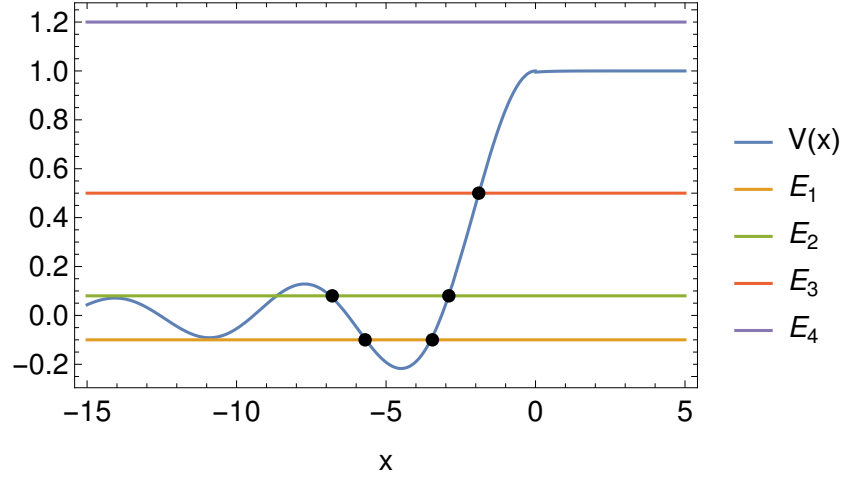


Figura 1.2: Ejemplo de de un una sistema mecánico sometido a un potencial para diferentes valores de la energía

podemos encontrar el potencial a través de proponer que la eigenfunción para la energía $E = \frac{k^2}{2}$ sea de la forma de una solución al problema de partícula libre modulada por una función $f(r)$

$$V(r) = E + \frac{1}{2} \frac{\nabla^2 \psi}{\psi} \quad (1.3)$$

$$\psi = f(r) \frac{\sin(kr)}{kr} \quad (1.4)$$

sustituyendo (1.4) en (1.3) y desarrollando la gradiente se llega a una expresión para el potencial en términos de la función de modulación

$$V(r) = k \cot kr \frac{f'(r)}{f(r)} + \frac{1}{2} \frac{f''(r)}{f(r)}, \quad \text{donde } ' \equiv \frac{d}{dr}..$$

Para asegurar que el sistema resultante tenga espectro de dispersión, necesitamos que el potencial sea acotado, para lo cual los ceros en $\sin kr$ y $f(r)$ se deben compensar con los ceros de $f'(r)$ y $f''(r)$ respectivamente. Peoponemos entonces que la derivada de $f(r)$ sea de la forma

$$f'(r) = g(r) \sin^n(kr)$$

Como caso inmediato, podemos estudiar lo que ocurre para $n = 1$ y $g(r) = k$

$$f'(r) = k \sin(kr) \Rightarrow \begin{aligned} f(r) &= -\cos(kr) \\ f''(r) &= k^2 \cos(kr) \end{aligned}$$

sustituyendo en el potencial, éste se reduce a

$$V(r) = -\frac{3}{2}k^2,$$

el cual no es más que el potencial de partícula libre desplazado, por lo que este caso no es de utilidad. Analicemos lo que ocurre para $n = 2$ y $g(r) = k$, entonces

$$f'(r) = k \sin^2(kr) \Rightarrow \begin{aligned} f(r) &= \frac{2kr - \sin(2kr)}{4} \\ f''(r) &= 2k^2 \sin(kr) \cos(kr) \end{aligned}$$

por lo que el potencial es de la forma

$$V(r) = \frac{16k^2 \sin(2kr)}{2kr - \sin(2kr)}.$$

En este caso, hemos obtenido un potencial acotado, sin embargo, la función de onda queda de la forma

$$\psi(k, r) = \frac{[2kr - \sin(2kr)] \sin(kr)}{4kr},$$

por lo que asintóticamente, esta función va como $\sin(kr)$, por lo que no es una función de cuadrado integrable.

A pesar de no haber obtenido una solución de la forma deseada en el análisis anterior, podemos modificarlo proponiendo una función de modulación de la forma de una composición de funciones, lo que permite usar la regla de la cadena para obtener su derivada

$$f(r) = f(h(r)) \Rightarrow f'(r) = \frac{dh}{dr} \frac{df}{dh}$$

donde las respectivas funciones son

$$\begin{aligned} f(r) &= \frac{1}{A^2 - 16h^2(r)} \\ h(r) &= \frac{2kr - \sin(2kr)}{4}, \end{aligned}$$

donde A es una constante real cuyo propósito es evitar que el denominador de $f(r)$ cause singularidades tanto en el potencial como en la función de onda. Además, podemos observar que $h(r)$ es de la misma forma que $f(r)$ en el caso anterior, por lo que

$$\frac{dh}{dr} = k \sin^2(kr).$$

La función de modulación tiene finalmente la forma requerida. Más aún, la función de onda resulta ser de la forma

$$\psi(r) = \frac{\sin(kr)}{kr \{A^2 - [2kr - \sin(2kr)]^2\}}.$$

Como ésta es una función con una envolvente que va como $\frac{1}{r^3}$, es una función de cuadrado integrable.

Lo único que resta es obtener la forma del potencial por medio de la fórmula (1.3.1), donde los ceros de $\sin(kr)$ han sido compensados por la forma de $f(r)$, y ya que ésta misma carece de ceros, no es necesario analizar los otros dos términos. El potencial está dado por la expresión analítica

$$\begin{aligned} V(r) &= -\frac{64k^2 A^2 \sin^4(kr)}{\{A^2 + [2kr - \sin(2kr)]^2\}^2} \\ &+ \frac{48k^2 \sin^4(kr) - 8k^2 [2kr - \sin(2kr)] \sin(2kr)}{A^2 + [2kr - \sin(2kr)]^2} \end{aligned}$$

y se puede escribir de acuerdo a su comportamiento como

$$V(r) = a \frac{\sin br}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right). \quad (1.5)$$

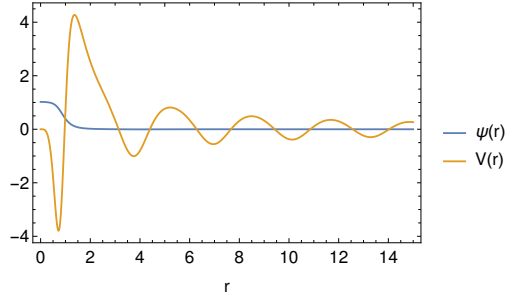


Figura 1.3: Potencial de von Neumann - Wigner (línea punteada) y su correspondiente estado ligado en el continuo (línea sólida) para $k = 1$ y $A = 1$.

donde $b = 2k$ y $a = 4k^2$. En trabajos posteriores, se demostró que los potenciales de la forma 1.5 pueden alojar un estado ligado en el continuo en $E = \frac{b^2}{4}$, siempre que $|b| < |a|$. La figura 1.3 muestra el gráfico de un potencial creado mediante este método.

Aunque se ha demostrado que matemáticamente se pueden construir sistemas que admitan estados ligados en el continuo, el sistema creado por método presentado en esta sección tiene dos importantes limitantes. La primera es de índole matemática y se debe a que sólo se puede conocer de manera analítica una de sus soluciones, que es precisamente aquella correspondiente al estado ligado en el continuo. La segunda y más importante se encuentra en la física, ya que no se ha encontrado en la naturaleza un potencial que se comporte de esta manera. Por consiguiente, se han propuesto métodos para la construcción de sistemas cuánticos solubles, en donde uno de los más populares es la transformación de Darboux, la cual estudiaremos en la siguiente sección.

Capítulo 2

Transformación de Darboux

La transformación de Darboux es una herramienta que permite construir una ecuación diferencial a partir de otra, con la principal característica que las soluciones de la nueva ecuación están dadas en función a las soluciones del sistema anterior. A continuación se muestra la deducción de esta herramienta.

2.1. Esquema general

Partiendo de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y en unidades adecuadas ($\frac{\hbar}{2m} = 1$)

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E \quad : \quad \hat{H} = -\frac{d^2}{dr^2} + V_0(r) \quad (2.1)$$

Si aplicamos un operador \hat{D} a ambos lados de (2.1)

$$\hat{A}\hat{H}\psi_E = E\hat{A}\psi_E$$

podemos escribir el lado izquierdo de esta nueva ecuación en términos del conmutador de ambos operadores

$$(\hat{H}\hat{A} - [\hat{H}, \hat{A}])\psi_E = E\hat{A}\psi_E \quad (2.2)$$

El operador \hat{A} se define en representación de coordenadas como

$$\hat{A} = \frac{d}{dr} - \beta(r)$$

por lo que el conmutador se puede escribir de la forma

$$[\hat{H}, \hat{A}] = \beta'' + 2\beta' \frac{d}{dr} - V_0'.$$

Para escribir esta expresión en términos de \hat{A} , podemos sumar un cero de la forma

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{A}] &= \beta'' + 2\beta' \frac{d}{dr} - 2\beta' \beta + 2\beta' \beta - V_0' \\ &= (\beta' + \beta^2 - V_0)' + 2\beta' \hat{A}. \end{aligned}$$

Finalmente, la ecuación (2.2) en términos de un nuevo hamiltoniano \hat{H}_1

$$\hat{H}_1 \hat{A} \psi_E - (\beta' + \beta^2 - V_0)' \psi_E = E \hat{A} \psi_E \quad (2.3)$$

la cual tiene la forma de una ecuación de Schrödinger con potencial $V_1 = V_0 - 2\beta'$ y soluciones $\hat{A} \psi_E$, siempre y cuando la siguiente condición se satisfaga

$$\beta' + \beta^2 - V_0 = \epsilon. \quad (2.4)$$

La expresión (2.4) es conocida como "Ecuación de Riccati", que es una ecuación de segundo grado, y se puede linearizar proponiendo la siguiente forma para β

$$\beta = \frac{u'}{u}$$

Finalmente, auatituyendo β en la ecuación de Riccati, ésta es mapeada a una ecuación de Schrödinger con potencial V_0 y energía ϵ .

$$-u'' + V_0 u = \epsilon u$$

Esto quiere decir que mediante una solución particular a una ecuación de Schrödinger con potencial V_0 podemos construir una nueva ecuación cuyo potencial y soluciones estarán dadas a partir de las siguientes relaciones

$$V_1 = V_0 - 2 \frac{d^2}{dr^2} \ln \psi_\epsilon \quad (2.5)$$

$$\psi_E^{(1)} = \frac{W(\psi_\epsilon, \psi_E)}{\psi_\epsilon}. \quad (2.6)$$

La función ψ_ϵ se conoce como "Función de transformación" o "función semilla", mientras que $W(\cdot, \cdot)$ denota el wronskiano de dos funciones. Ya que la expresión para $\psi_E^{(2)}$ contiene a la función de transformación como denominador, es necesario que ésta no tenga ceros para evitar singularidades en las soluciones del nuevo sistema. Por lo tanto, sólo es posible usar el estado base o una solución no física, lo cual limita la usabilidad de la herramienta. A continuación se mostrará el uso de la herramienta aplicada tomando como sistema inicial el oscilador armónico unidimensional

2.1.1. Ejemplo: Oscilador armónico

Como sistema inicial, tomamos un oscilador armónico, descrito por la ecuación de Scrödinger

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + x^2\psi = E\psi. \quad (2.7)$$

En este caso, $\frac{\hbar}{2m} = \frac{m\omega^2}{2} = 1$. Existen varias formas de resolver este sistema, tales como el método de factorización o el método de serie de potencias. Sin embargo, con el propósito de obtener una forma general para las soluciones, incluyendo las que no tienen un significado físico, se puede mapear (2.7) a una ecuación hipergeométrica cuya solución general es

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A {}_1F_1\left(a, \frac{1}{2}, x^2\right) e^{-\frac{x^2}{2}} + B {}_1F_1\left(a+1, \frac{3}{2}, x^2\right) x e^{-\frac{x^2}{2}} \\ a &= \frac{1-E}{4} \end{aligned}$$

donde ${}_1F_1$ es la función hipergeométrica dada en términos del símbolo de Pochhammer

$${}_1F_1(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} \frac{z^n}{n!}, \quad (a)_n = \prod_{k=0}^{n-1} (a + k)$$

Por lo tanto, para obtener las soluciones con significado físico, es necesario truncar la función hipergeométrica, lo cual se logra a través de imponer que el primer argumento de la misma sea un número entero negativo $-n$. Ya que $a \neq a + \frac{1}{2}$, tenemos entonces dos casos

$$\begin{aligned} \frac{1-E}{4} = -n &\Rightarrow E = 4n + 1 \\ \frac{3-E}{4} = -n &\Rightarrow E = 4n + 3 \end{aligned}$$

lo que divide las soluciones en dos conjuntos de funciones con paridad definida

$$\begin{aligned} \psi_e(x) &= A {}_1F_1\left(-\frac{n}{2}, \frac{1}{2}, x^2\right) e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad n \text{ par} \\ \psi_o(x) &= B {}_1F_1\left(-\frac{n+1}{2}, \frac{3}{2}, x^2\right) x e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad n \text{ impar.} \end{aligned}$$

El espectro de energía está constituido por un conjunto de valores discretos dados por la regla de cuantización

$$E = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Una vez obtenido el conjunto de estados, podemos proceder a utilizar las fórmulas (2.5) y (2.6) para construir un nuevo sistema, empezando por utilizar el estado base como función de transformación, por lo que el potencial está dado por

$$V^{(1)} = x^2 - 2 \frac{d^2}{dx^2} \ln(e^{-\frac{x^2}{2}}) = x^2 + 4.$$

Este no es más que el potencial de partida desplazado, por lo que es físicamente equivalente, por lo que este resultado no es de interés.

Por otro lado, si se usa como función de transformación una solución asociada a un eigenvalor E menor al correspondiente al estado base, se observa que al transfor-

mar el estado base se obtiene una función con un nodo, lo que sugiere que el estado base del nuevo sistema se puede obtener a partir de una solución no física. Este tipo de estados son comúnmente llamados "missing states", los cuales se pueden calcular a partir de asumir la ortogonalidad entre los estados ligados

$$(\psi_m^{(1)}, \psi_E^{(1)}) = 0$$

donde (\cdot, \cdot) denota el producto interno de dos funciones y $\psi_m^{(1)}$ es el missing state. Ya que sabemos que todos los demás estados están dados por la transformación de Darboux, entonces

$$(\psi_m^{(1)}, \hat{A}\psi_E) = 0,$$

y como \hat{A} es hermitiano

$$(\hat{A}^\dagger \psi_m^{(1)}, \psi_E) = 0,$$

se concluye que la ecuación para obtener el missing state es

$$\psi_m^{(1)} = \frac{1}{\psi_\epsilon},$$

La figura 2.1 muestra un ejemplo de un sistema con un missing state.

La transformación de Darboux se puede aplicar de forma iterativa, lo que permite utilizar el resto de los estados como funciones semilla para la construcción de nuevos sistemas. Este método es conocido como transformación de Darboux de orden superior, el cual se estudiará en la siguiente sección.

2.2. Transformación de Darboux de orden superior

Si tenemos un sistema dado por un potencial construido a partir de (2.5) y lo usamos como punto de partida para aplicar nuevamente la transformación de Darboux, la función de semilla debe ser de la forma

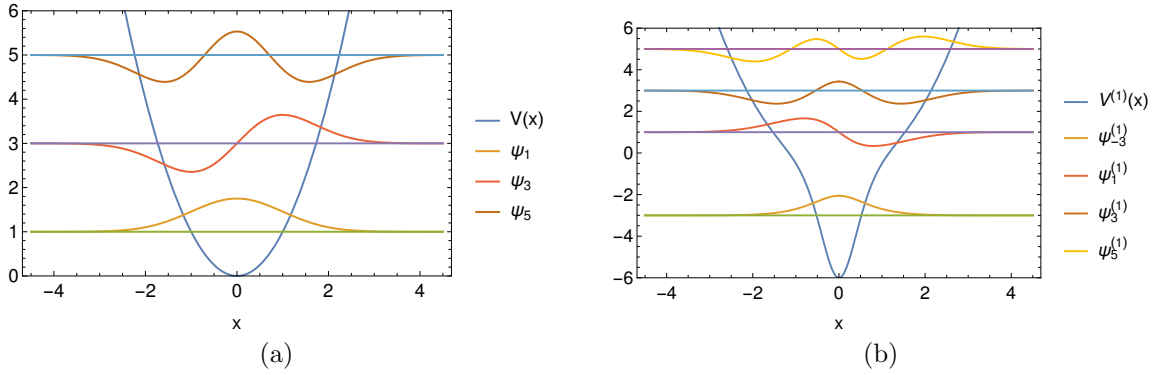


Figura 2.1: (a) Oscilador armónico con sus estados correspondientes a los tres primeros niveles energéticos, el cual se toma como sistema inicial para construir (b), usando como función de transformación ψ_e correspondiente a $E = -3$. Dicho sistema cuenta con un nivel energético extra, correspondiente al mismo eigen valor de la función de transformación.

$$\psi_T = \frac{W(\psi_{\epsilon_1}, \psi_{\epsilon_2})}{\psi_{\epsilon_1}}.$$

De manera que el nuevo potencial estará dado por

$$V^{(2)} = V^{(1)} - 2 \frac{d^2}{dr^2} \ln \psi_T = V_0 - 2 \frac{d^2}{dr^2} \ln[W(\psi_{\epsilon_1}, \psi_{\epsilon_2})], \quad (2.8)$$

mientras que las soluciones al nuevo sistema son obtenidas por medio de la relación

$$\psi_E^{(2)} = \frac{\psi_{\epsilon_1} W \left[\frac{W(\psi_{\epsilon_1}, \psi_{\epsilon_2})}{\psi_{\epsilon_1}}, \frac{W(\psi_{\epsilon_1}, \psi_E)}{\psi_{\epsilon_1}} \right]}{W(\psi_{\epsilon_1}, \psi_{\epsilon_2})},$$

que se puede reducir por medio de las siguientes propiedades de los wronskianos

$$\begin{aligned} W[f(r)g(r), f(r)h(r)] &= f^2(r)W[g(r), h(r)] \\ W\{W[f(r), g(r)], W[f(r), h(r)]\} &= f(r)W[f(r), g(r), h(r)]. \end{aligned}$$

La expresión final queda entonces en función de dos funciones de transformación, las cuales son soluciones asociadas al potencial V_0

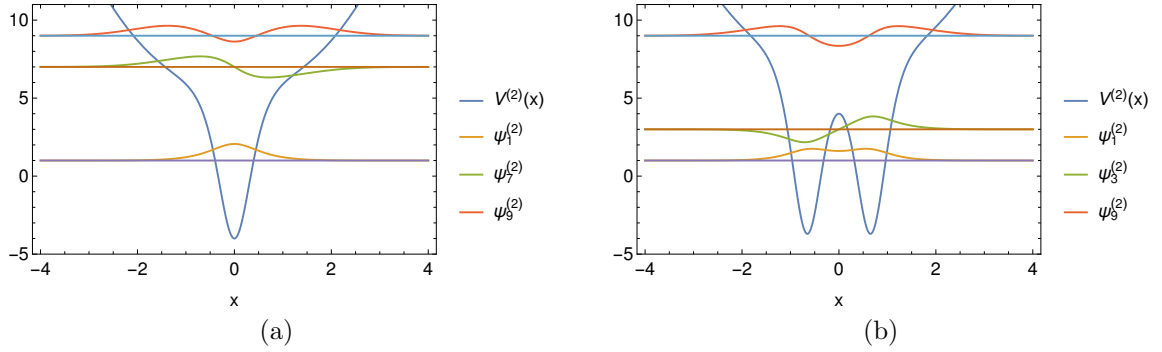


Figura 2.2: Sistemas construidos a partir del oscilador armónico mostrado en la figura 2.1 a través de la transformación de Darboux de segundo orden tomando como funciones de transformación (a) el primero y segundo estado excitado, correspondientes a $\epsilon_1 = 3$, $\epsilon_2 = 5$ y (b) el segundo y tercer estados excitados con $\epsilon_1 = 5$, $\epsilon_2 = 7$.

$$\psi_E^{(2)} = \frac{W(\psi_{\epsilon_1}, \psi_{\epsilon_2}, \psi_E)}{W(\psi_{\epsilon_1}, \psi_{\epsilon_2})}. \quad (2.9)$$

A diferencia de la transformación de Darboux de primer orden, en este caso tenemos que asegurar que el wronskiano de ambas funciones de transformación sea diferente de cero, lo que extiende la utilidad de la herramienta al permitirnos usar dos estados ligados del sistema inicial como funciones semilla. Sin embargo, los potenciales mostrados en la figura ?? sugieren que los mismos están libres de singularidades solo para el caso en que los niveles energéticos de las funciones de transformación sean contiguos, es decir $\epsilon_2 = \epsilon_1 + 2$ para el caso del oscilador armónico, tal como el sistema ilustrado en la figura 2.2. En caso contrario, el potencial tendrá un número de singularidades igual a la "distancia" entre los niveles energéticos entre las funciones de transformación (véase figura 2.3).

Es importante mencionar que ahora que tenemos dos funciones de transformación, en este caso puede ser posible la existencia de dos missing states, dependiendo de las funciones de transformación que se usen.

La transformación de Darboux se puede seguir aplicando de manera iterativa para obtener versiones de orden superior de esta herramienta, cuya generalización es conocida como transformación de Crum

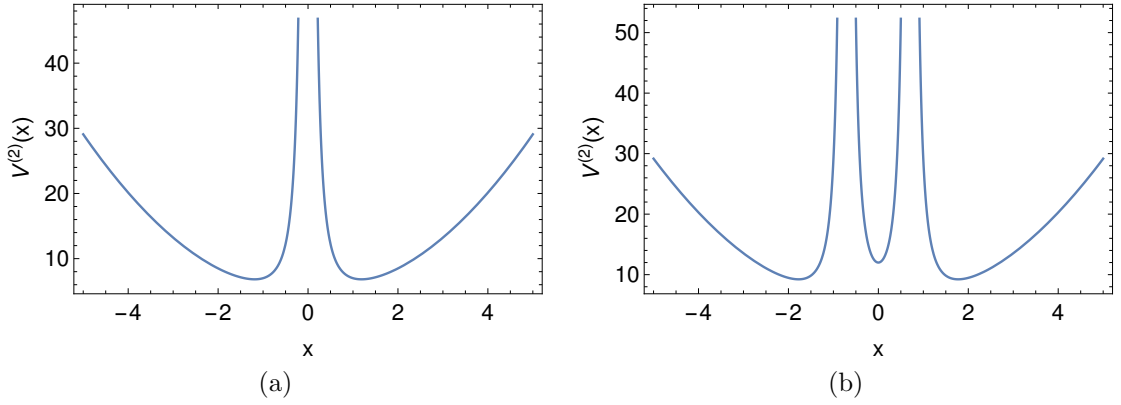


Figura 2.3: Potenciales construidos a partir de la transformación de Darboux de segundo orden tomando como funciones semilla, las soluciones de cuadrado integrable correspondientes a (a) $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 5$ y (b) $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 7$. Para el caso de (a), existe un nivel de diferencia entre ambas funciones, el cual es $E = 3$, por lo que el potencial resultante cuenta con una singularidad.

$$V^{(n)} = V_0 - 2 \frac{d^2}{dr^2} \ln[W(\psi_{\epsilon_1}, \dots, \psi_{\epsilon_n})]$$

$$\psi^{(n)} = \frac{W(\psi_{\epsilon_1}, \dots, \psi_{\epsilon_n}, \psi_E)}{W(\psi_{\epsilon_1}, \dots, \psi_{\epsilon_n})}.$$

Esta herramienta ha sido ampliamente estudiada para la construcción de sistemas por medio de la ingeniería de la parte discreta del espectro. Sin embargo, la transformación puede ser usada también en el régimen continuo con la adecuada modificación de la herramienta, proceso que se presentará en la siguiente sección.

2.3. Transformación de Darboux degenerada

En la subsección anterior, observamos como al usar la transformación de Darboux de segundo orden, el potencial resultante era no singular si las se usaban como funciones de transformación soluciones de cuadrado integrable (estados ligados), cuyos respectivos eigenvalores eran "contiguos". Siguiendo esta idea, analizaremos lo que ocurre al construir un sistema por medio de la transformación de Darboux de

segundo orden tomando dos soluciones de la dispersión cuyos valores sean contiguos, lo cual en el contexto continuo significa

$$\epsilon_2 = \epsilon_1 + \eta : |\eta| \ll 1.$$

Por lo que podemos expandir la solución ψ_{ϵ_2} en una serie de Taylor alrededor de ϵ_1

$$\psi(\epsilon_1 + \eta) = \psi(\epsilon_1) + \eta \partial_{\epsilon_1} \psi(\epsilon_1) + O(\eta^2).$$

Entonces las soluciones de un sistema dado por la transformación de Darboux de segundo orden están dadas por

$$\psi^{(2)} = \frac{W[\psi(\epsilon_1), \psi(\epsilon_1) + \eta \partial_{\epsilon_1} \psi(\epsilon_1) + O(\eta^2), \psi(E)]}{W[\psi(\epsilon_1), \psi(\epsilon_1) + \eta \partial_{\epsilon_1} \psi(\epsilon_1) + O(\eta^2)]}.$$

Gracias a la linealidad del wronskiano, podemos escribir numerador y denominador con η como factor común

$$\psi^{(2)} = \frac{\eta \{W[\psi(\epsilon_1), \partial_{\epsilon_1} \psi(\epsilon_1), \psi(E)] + W[\psi(\epsilon_1), O(\eta^2), \psi(E)]\}}{\eta \{W[\psi(\epsilon_1), \partial_{\epsilon_1} \psi(\epsilon_1)] + W[\psi(\epsilon_1), O(\eta^2)]\}},$$

para finalmente calcular el caso cuando $\eta \rightarrow 0$, lo que anula el segundo término en los corchetes tanto del numerador como del denominador

$$\psi^{(2)} = \frac{W[\psi(\epsilon_1), \partial_{\epsilon_1} \psi(\epsilon_1), \psi(E)]}{W[\psi(\epsilon_1), \partial_{\epsilon_1} \psi(\epsilon_1)]}, \quad (2.10)$$

Siguiendo un procedimiento similar, se obtiene la fórmula para calcular el potencial deformado

$$V^{(2)} = V_0 - 2 \frac{d^2}{dr^2} \ln \{W[\psi(\epsilon_1), \partial_{\epsilon_1} \psi(\epsilon_1)]\}, \quad (2.11)$$

Es importante resaltar que el wronskiano sigue estando dado en términos de la posición, por lo que en las secciones restantes se volverá a usar la notación con subíndices $\psi(E) = \psi_E$. Las fórmulas (2.10) y (2.11) son equivalentes a realizar la transformación de Darboux de segundo orden con dos funciones semilla degeneradas, por lo que este esquema es conocido como transformación de Darboux con degeneración.

La herramienta construida a lo largo de esta sección será utilizada tomando como sistema de partida potenciales de corto alcance, ya que estos siempre cuentan con un régimen de dispersión y cuyas generalidades se estudiarán en la siguiente sección.

Capítulo 3

Potenciales de corto alcance

En este trabajo de tesis, se va a trabajar con potenciales de corto alcance radiales con momento angular $l = 0$ como sistema de partida, los cuales de forma general son de la forma

$$V(r) = \begin{cases} V^{(i)}(r) & r < R \\ 0 & R < r \end{cases} \quad (3.1)$$

donde la región $r < R$ es conocida como región de interacción”, mientras que R será referido como ”punto de corte”. La ecuación de Schrödinger correspondiente a esta región es

$$-\frac{d^2 u^{(i)}}{dr^2} + V^{(i)}(r)u^{(i)} = Eu^{(i)}$$

donde $\frac{\hbar}{2m} = 1$. Al ser una ecuación de segundo grado, la solución general estará dada por una combinación lineal de dos funciones linealmente independientes

$$u^{(i)}(E, r) = A_i u_1^{(i)}(E, r) + B_i u_2^{(i)}(E, r)$$

Las soluciones a esta ecuación con significado físico son aquellas que son regulares en el origen, es decir

$$u^{(i)}(E, r)|_{r=0} = 0, \quad (3.2)$$

por lo que podemos escribir una de las constantes arbitrarias en términos de la otra

$$u^{(i)}(E, r) = A_i \left[u_1^{(i)}(E, r) - \frac{u_1^{(i)}(E, 0)}{u_2^{(i)}(E, 0)} u_2^{(i)}(E, r) \right].$$

Por lo general, se escribe la dependencia energética en términos de un parámetro $k^2 = E$, y a lo largo de este trabajo se usarán ambas representaciones según sea conveniente. Por otro lado, para la región $R < r$, la ecuación correspondiente es

$$\frac{d^2 u^{(e)}}{dr^2} + k^2 u^{(e)} = 0,$$

por lo que podemos obtener la solución general para esta región de manera explícita

$$u^{(e)}(k, r) = A_e e^{ikr} + B_e e^{-ikr}.$$

La función de onda completa correspondiente al potencial (3,1) es entonces

$$u(k, r) = \begin{cases} A_i \left[u_1^{(i)}(k, r) - \frac{u_1^{(i)}(k, 0)}{u_2^{(i)}(k, 0)} u_2^{(i)}(k, r) \right] & r < R \\ A_e e^{ikr} + B_e e^{-ikr} & R < r \end{cases}. \quad (3.3)$$

Este análisis permite obtener expresiones generales para sistemas caracterizados por un potencial de corto alcance cuyo umbral es $E = 0$, que contiene tanto espectro de dispersión como de estados ligados, los cuales serán estudiados en la siguiente subsección.

3.0.1. Estados ligados

Los estados ligados en este tipo de sistemas, están dados para valores de la energía $k^2 = E < 0$, por lo que en este caso el parámetro k es un número puramente imaginario. Para obtener una función de cuadrado integrable, necesitamos restringir el dominio de κ y a partir de esto anular la constante arbitraria que acompañe a la solución exponencial creciente fuera de la región de interacción, en este caso elegimos $\kappa > 0$

$$u(k, r) = \begin{cases} A_i \left[u_1^{(i)}(\kappa, r) - \frac{u_1^{(i)}(\kappa, 0)}{u_2^{(i)}(\kappa, 0)} u_2^{(i)}(\kappa, r) \right] & r < R \\ A_e e^{-\kappa r} & R < r \end{cases}. \quad (3.4)$$

En este tipo de problemas donde la solución es una función a trozos, es importante asegurar que ésta sea univaluada y que su primera derivada sea continua. Por lo tanto, en el punto de corte, las funciones para cada región, así como su respectiva derivada, deben ser iguales

$$A_i u^{(i)}(\kappa, R) = A_e e^{-\kappa R} \quad (3.5)$$

$$A_i \partial_r u^{(i)}(\kappa, r)|_{r=R} = A_e \partial_r e^{-\kappa r}|_{r=R} \quad (3.6)$$

Este sistema de ecuaciones es conocido como condiciones de continuidad”, y permite obtener los valores de los coeficientes que acompañan a la función de onda. Sin embargo, la forma de las ecuaciones implica que A_i y A_e sean linealmente dependientes, por lo que la primera ecuación (3,5) se usa para obtener el valor de uno de ellos

$$A_e = A_i u^{(i)}(\kappa, R) e^{\kappa R}.$$

Al sustituir el valor de A_e en la segunda condición de continuidad (3,6) se llega a la ecuación

$$u^{(i)}(\kappa, R) \partial_r e^{-\kappa r}|_{r=R} - \partial_r u^{(i)}(\kappa, r)|_{r=R} e^{-\kappa R} = 0$$

el lado izquierdo de esta expresión no es mas que el wronskiano entre la soluciones de la región interna y la región externa

$$W[u^{(i)}(\kappa, r), e^{-\kappa r}]_{r=R} = 0. \quad (3.7)$$

A partir de esta ecuación, podemos obtener los valores de κ para los cuales la función de onda es continua y de cuadrado integrable, obteniendo valores puntuales de la energía, es decir un espectro discreto. En la siguiente subsección, se construirá

el resto del espectro, dado por funciones de onda acotadas.

3.0.2. Estados de dispersión

Para el caso de la dispersión, tomamos valores de $E > 0$, por lo que k es un número real. Entonces como la función (3,3) cumple el requerimiento de ser acotada, lo único que resta es asegurar su continuidad a través de las ecuaciones

$$\begin{aligned} A_i u^{(i)}(k, R) &= A_e e^{ikR} + B_e e^{-ikR} \\ A_i \partial_r u^{(i)}(k, r)|_{r=R} &= ik A_e e^{ikR} - ik B_e e^{-ikR} \end{aligned}$$

A diferencia del caso de los estados ligados, esta vez tenemos tres coeficientes y dos ecuaciones, por lo que uno de los coeficientes será nuevamente una constante de normalización, mientras que la variable de energía podrá tomar cualquier valor tal que $E > 0$, formando un espectro continuo. Al resolver (3,8) para A_e y B_e , obtenemos

$$\begin{aligned} B_e &= \frac{W[u^{(i)}(k, r), e^{-ikr}]|_{r=R}}{W[e^{ikr}, e^{-ikr}]} \\ C_e &= -\frac{W[u^{(i)}(k, r), e^{ikr}]|_{r=R}}{W[e^{ikr}, e^{-ikr}]} \end{aligned}$$

Como las funciones $e^{\pm ikr}$ son complejos conjugados entre si y $u^{(i)}(k, r)$ es puramente real, los coeficientes cumplen la simetría $C_e = -B_e^*$, permitiendo escribir la función de onda de la forma

$$u(k, r) = A \begin{cases} \left[u_1^{(i)}(k, r) - \frac{u_1^{(i)}(k, 0)}{u_2^{(i)}(k, 0)} u_2^{(i)}(k, r) \right] & r < R \\ \frac{\text{Im}\{W[u^{(i)}(k, r), e^{ikr}]_{r=R} e^{-ikr}\}}{\text{Im}[e^{ikr} \partial_r e^{ikr}]_{r=R}} & R < r \end{cases} \quad (3.8)$$

Las expresiones obtenidas en esta sección pueden ser modificadas para obtener la forma de las funciones de onda asociadas a potenciales definidos por dos regiones, lo cual será de utilidad en las secciones posteriores.

Capítulo 4

Potenciales de corto alcance Darboux - deformados

4.1. Problema de partícula libre

Para entender la utilidad de la transformación de Darboux degenerada en la construcción de estados ligados en el continuo, se estudia la deformación del potencial radial de partícula libre $V = 0 \forall r$ con momento angular $l = 0$. En este caso, la correspondiente ecuación de Schrödinger (con $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$) es

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + k^2 u = 0, \quad k^2 = E$$

Basándonos en la forma asintótica del potencial que se quiere crear, se propone la siguiente solución particular como función de transformación

$$u_T(q, r) = A(q) \sin[qr + \delta(q)]$$

Es decir, es una solución correspondiente al eigenvalor $E_q = q^2$. Para construir el potencial, el correspondiente wronskiano es de la forma

$$W_d = W[u_T, \partial_q u_T] = \frac{1}{2} [\sin[2(qr + \delta)] - 2q(r + \gamma_0)]. \quad (4.1)$$

En este caso, se ha denotado 4.1 como tal debido a que es también la expresión correspondiente al denominador de las funciones transformadas. Sustituyéndolo en

la fórmula (), se obtiene la expresión analítica para el potencial del nuevo sistema

$$V_2 = 32q^2 \frac{\sin \theta - q(r + \gamma_0) \cos \theta}{\sin(2\theta) - 2q(r + \gamma_0)} \sin \theta$$

donde $qr + \delta = \theta$, $\gamma_0 = \partial_q \delta$

El potencial es del tipo von Neumann - Wigner, ya que su comportamiento asintótico es de la forma

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V_q^{(2)}(r) \rightarrow -4q \frac{\sin 2\theta}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right),$$

por lo tanto, la existencia de un estado ligado en el continuo es posible, de tal forma que éste correspondería a la energía $E = q^2$, el cual es precisamente el eigenvalor asociado a la función de transformación. Convencionalmente, de acuerdo al esquema de la transformación de Darboux, la función de transformación es mapeada a el caso trivial, sin embargo, al estar trabajando en el régimen continuo, se puede analizar lo que sucede en el límite $E \rightarrow q^2$, procedimiento a realizar en la subsección siguiente.

Para obtener el conjunto de soluciones del nuevo sistema, se realiza la transformación del par de soluciones linearmente independientes del sistema de partida $u^\pm = e^{\pm ikr}$, para lo cual se calcula el correspondiente wronskiano

$$W_n^\pm = \frac{1}{2} [2q(k^2 - q^2)(r + \gamma_0) - (k^2 + q^2) \sin(2\theta) \pm 4ikq \sin^2 \theta] e^{\pm ikr}$$

las soluciones del nuevo sistema están dadas por

$$\psi^\pm = \frac{2q(k^2 - q^2)(r + \gamma_0) - (k^2 + q^2) \sin(2\theta) \pm 4ikq \sin^2 \theta}{\sin(2\theta) - 2q(r + \gamma_0)} e^{\pm ikr} \quad (4.2)$$

Al examinar el comportamiento asintótico de estas funciones

$$\psi^\pm|_{r \rightarrow \infty} = -(k^2 - q^2) e^{\pm ikr}, \quad (4.3)$$

,

se observa que tienen el mismo comportamiento de las funciones de partida, con la diferencia de un factor proporcional. Podemos entonces escribir las soluciones de

manera que (4.3) sea de amplitud 1 (soluciones de Jost)

$$f^\pm = -\frac{\psi^\pm}{(k^2 - q^2)}$$

este análisis permite también observar que las funciones transformadas son linealmente independientes, por lo que la solución completa del sistema deformado como una combinación lineal de las funciones de Jost

$$\psi_s = A(k)f^+(k, r) + B(k)f^-(k, r) \quad (4.4)$$

Podemos entonces aplicar entonces la condición a la frontera propia de un problema radial dejando solo una constante arbitraria, la cual por conveniencia se define como $A = \frac{1}{2i}$

$$\psi_s(k, 0) = 0 \implies \psi_s(k, r) = \frac{1}{2i} \left[f^+(k, r) - \frac{f^+(k, 0)}{f^-(k, 0)} f^-(k, r) \right]$$

para $\delta = 0$, usando identidades trigonométricas, se puede escribir ψ_s como

$$\psi_s(k, r) = \sin(kr) + 2q \left\{ \frac{\sin[(k+q)r]}{k+q} - \frac{\sin[(k-q)r]}{k-q} \right\} \frac{\sin qr}{\sin(2qr) - 2q(r + \gamma_0)}$$

de esta manera es fácil observar que el polo $-\frac{1}{(k^2 - q^2)}$ introduce una singularidad removible, por lo que se puede usar la regla de L'Hopital para obtener el límite cuando $k \rightarrow q$

$$\psi_{bic}(q, r) = \lim_{k \rightarrow q} \psi_s(k, r) = \frac{2q\gamma_0 \sin(qr)}{\sin(2qr) - 2q(r + \gamma_0)}$$

ya que el numerador en ψ_b es acotado, para valores grandes de r , la función se desvanece, es decir, es una función de cuadrado integrable, y ya que $q > 0$, dicha función pertenece a la parte continua del espectro, por lo tanto es un estado ligado en el continuo.

Ya que un potencial de von Neumann Wigner está definido por su comportamiento asintótico, en la siguiente sección se propone extender el procedimiento realizado tomando como sistema de partida un potencial de corto alcance, ya que estos poten-

ciales se comportan precisamente como un problema de partícula libre para valores muy grandes de r .

Aunque el objetivo principal de este trabajo es la construcción de sistemas que admitan la existencia de estados ligados en el continuo, la forma del potencial obtenido tiene regiones que cumplen con las condiciones necesarias para la existencia de estados ligados convencionales (véase figura 4,1a). Podemos aplicar las condiciones a la frontera vistas en la sección 3,0,1 a la función (4,4), quedando de la forma

$$\psi_b = A \frac{2q(\kappa^2 + q^2)(r + \gamma_0) - (\kappa^2 - q^2) \sin(2\theta) + 4\kappa q \sin^2 \theta}{\sin(2\theta) - 2q(r + \gamma_0)} e^{-\kappa r}.$$

Para obtener la condición de cuantización, aplicamos la condición a la frontera en el origen

$$\psi_b|_{r=0} = 0 \Rightarrow 2q\gamma_0(\kappa^2 + q^2) - (\kappa^2 - q^2) \sin(2\delta) + 4\kappa q \sin^2 \delta = 0.$$

Para el caso $\delta = 0$, los términos que incluyen la función seno se anulan y la ecuación se reduce a

$$\kappa^2 + q^2 = 0,$$

la cual no tiene soluciones en los números reales. Podemos concluir entonces que el potencial mostrado en la figura 4,1a no tiene estados ligados

4.2. Potenciales de corto alcance Darboux - deformados

Partiendo de un sistema cuyo potencial es de la forma (3,1), el potencial en la región de interacción se toma como casi arbitrario, sólo exigiendo que su solución a la ecuación de Schrödinger sea puramente real

$$-\frac{d^2 u^{(i)}}{dr^2} + V^{(i)} u^{(i)} = E u^{(i)} : u^{(i)} \in \mathbb{R}. \quad (4.5)$$

Lo siguiente es elegir la función de transformación. Basado en el análisis de la sección anterior, dicha función es la siguiente

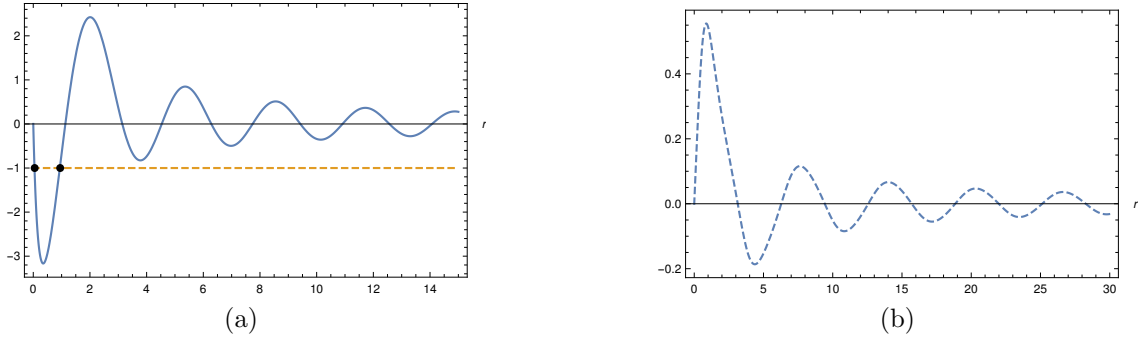


Figura 4.1: (a) Potencial de partícula libre deformado a partir de la transformación de Darboux degenerada (línea sólida) para $\delta = 0$ y $\gamma_0 = 1$. La línea punteada representa un hipotético valor para la energía perteneciente a un estado ligado. (b) Función de onda correspondiente al estado ligado en el continuo

$$u_T(q, r) = \begin{cases} A(q)u^{(i)}(q, r) & r < R \\ \sin[qr + \delta(q)] & R < r \end{cases} \quad (4.6)$$

donde $u^{(i)}$ es solución a la ecuación (4,5). La continuidad de la función de transformación está contenida en el par de ecuaciones

$$Au^{(i)}(q, R) = \sin(qR + \delta) \quad (4.7)$$

$$A\partial_r u^{(i)}(q, r)|_{r=R} = q \cos(qR + \delta). \quad (4.8)$$

La función (4,6) y sus condiciones de continuidad tienen una forma similar al caso de los estados ligados (3,4), por lo que se llega a la ecuación

$$W[u^{(i)}(q, r), \sin(qr + \delta)]_{r=R} = 0,$$

indicando que en un sistema con construido a través de la Transformación de Darboux degenerada con parámetro R fijo, sólo para valores discretos de q la función de transformación es continua y diferenciable. Más aún, ya que las soluciones del nuevo sistema están dadas en términos de un wronskiano de tres funciones, sería necesaria la continuidad de la segunda derivada. La figura ?? muestra la comparación entre

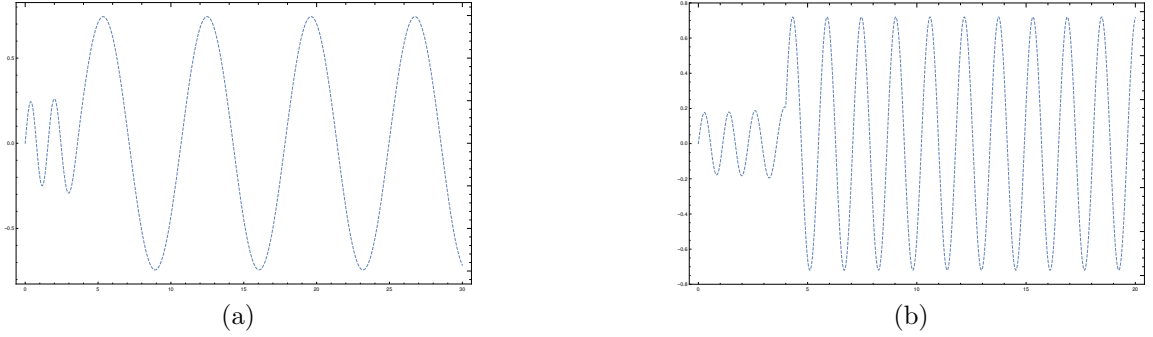


Figura 4.2: Funciones transformadas a partir del oscilador armónico truncado con un punto de corte $R = 4$ como sistema inicial y una función de transformación con parámetros $\delta = 0$, $\gamma_0 = 1$: (a) Función continua y diferenciable con $q = 0,880871$. b) Función continua pero no diferenciable con $q = 4$.

una función transformada a partir de un valor del parámetro q arbitrario y uno que cumple las condiciones necesarias para el caso del oscilador armónico truncado.

Para evitar esta limitante, podemos observar que la función de transformación no es más que una herramienta matemática, ya que lo que realmente importa son las funciones y el potencial transformados. Se propone entonces transformar las soluciones del sistema inicial de manera independiente para cada región y después imponer las condiciones de continuidad en el nuevo sistema. En las siguientes subsecciones, se implementará dicho método, comenzando por asegurar que las funciones del sistema deformado sean regulares en el origen.

4.2.1. Comportamiento del sistema deformado en el origen

Partiendo de un potencial de la forma (??) con la condición previamente impuesta, se procede a realizar la transformación de Darboux para la función de onda en la región interna de acuerdo a la fórmula ().

$$\psi^{(i)}(k, r) = \frac{W[u^{(i)}(q, r), \partial_q u^{(i)}(q, r), u^{(i)}(k, r)]}{W[u^{(i)}(q, r), \partial_q u^{(i)}(q, r)]} = \frac{W_n}{W_d} \quad (4.9)$$

Al ser un problema radial, es importante garantizar que $\psi^{(i)}(k, r)|_{r=0} = 0$, por lo que es natural pensar que esto se cumplirá al transformar soluciones al sistema inicial que sean regulares en el origen. Los dos sistemas a deformar en las secciones

posteriores (oscilador armónico truncado y pozo radial) poseen la propiedad en la cual sus soluciones linearmente independientes tienen paridad definida, es decir

$$u^{(i)}(k, r) = A_i u_e^{(i)}(k, r) + B_i u_o^{(i)}(k, r) \quad (4.10)$$

donde $u_e^{(i)}$ tiene paridad par y $u_o^{(i)}$ es una función impar. Por lo tanto, la solución que es regular en el origen es la de paridad impar. Sean entonces $u(E_k, r)$ y $u(E_q, r)$ soluciones a una ecuación de Schrödinger con paridad par. Los wronskianos correspondientes a la función transformada en el origen son

$$W_n|_{r=0} = \text{Det} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \partial_r u(E_q, 0) & \partial_r \partial_E u(E_q, 0) & \partial_r^2 u(E_k, 0) \\ \partial_r^2 u(E_q, 0) & \partial_r^2 \partial_E u(E_q, 0) & \partial_r^2 u(E_k, 0) \end{pmatrix} = 0$$

$$W_d|_{r=0} = \text{Det} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \partial_r u(E_q, 0) & \partial_r \partial_E u(E_q, 0) \end{pmatrix} = 0$$

Entonces podemos usar la regla de L'Hopital para obtener la forma de las soluciones al nuevo sistema en el origen. Con este fin, es importante tomar en cuenta lo siguiente:

La posición y la energía son variables independientes, por lo que es equivalente el evaluar la función en r y posteriormente derivar con respecto a E o viceversa

$$[\partial_E \partial_r u(E, r)]_{r=0} = \partial_E [\partial_r u(E, r)]_{r=0}$$

Al ser $u(E, r)$ solución a la ecuación de Schrödinger, su segunda derivada con respecto a la posición en el origen es

$$-\partial_r^2 u(E, r)|_{r=0} = [E - V(0)]u(E, 0), \quad (4.11)$$

y al derivar la expresión anterior con respecto a E se obtiene

$$-\partial_E \partial_r^2 u(E, r)|_{r=0} = u(E, 0) + [E - V(0)]\partial_E u(E, 0). \quad (4.12)$$

Además, ya que u_e y u_o son linearmente indepedientes, el wronskiano es diferente

de cero para todo r , incluyendo el origen [1]

$$W[u_e(E, r), u_o(E, r)]_{r=0} = [u_e(E, r)\partial_r u_o(E, r) - u_o(E, r)\partial_r u_e(E, r)]_{r=0} \neq 0 \quad (4.13)$$

En el caso de la función impar, las condiciones anteriores implican que

$$\begin{aligned} \partial_r^2 u_o(E, r)|_{r=0} &= \partial_E \partial_r^2 u_o(E, r)|_{r=0} = 0 \\ \partial_r u_o(E, r)|_{r=0} &\neq 0 \end{aligned}$$

Las propiedades anteriores implican que es necesario usar L'Hopital tres veces, por lo que la expresión final es

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{W_n}{W_d} = \frac{\lim_{r \rightarrow 0} \partial_r^3 W_n}{\lim_{r \rightarrow 0} \partial_r^3 W_d} = \frac{0}{[-\partial_r u_o(E, r)|_{r=0}]^2} = 0$$

Efectivamente, si se usa una solución impar (regular en el origen) como función de transformación para transformar soluciones de la misma paridad, se obtiene una función regular en el origen.

El resultado anterior, junto con el hecho de que la herramienta de la transformación de Darboux permite usar soluciones "no físicas" tanto como función de transformación o función a transformar (caso de "missing states"), nos invita a explorar el caso en el que partimos de un conjunto de soluciones a la ecuación de Schrödinger $u(E, r)$ con paridad par e irregulares en el origen

$$u(E, r)|_{r=0} \neq 0,$$

donde además, al ser su derivada de paridad par

$$\partial_r u(E, r)|_{r=0} = 0,$$

por lo que en este caso los wronskianos correspondientes a las funciones transformadas en el origen son

$$W_n|_{r=0} = Det \begin{pmatrix} u(E_q, 0) & \partial_E u(E_q, 0) & \partial_r^2 u(E_k, 0) \\ 0 & 0 & 0 \\ \partial_r^2 u(E_q, 0) & \partial_r^2 \partial_E u(E_q, 0) & \partial_r^2 u(E_k, 0) \end{pmatrix} = 0$$

$$W_d|_{r=0} = Det \begin{pmatrix} \partial_r u(E_q, 0) & \partial_r \partial_E u(E_q, 0) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0$$

Entonces, al igual que en el caso anterior, podemos usar L'Hopital en $r \rightarrow 0$, donde las propiedades (4,11) y (4,12) implican que

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{W_n}{W_d} = \frac{\lim_{r \rightarrow 0} \partial_r W_n}{\lim_{r \rightarrow 0} \partial_r W_d} = \frac{0}{[-u_e(E, r)|_{r=0}]^2} = 0$$

Podemos decir entonces que la transformación de Darboux degenerada permite obtener soluciones regulares en el origen si se toma una función con paridad definida como función de transformación y se transforman funciones de la misma paridad.

Más aún, podemos analizar un tercer caso, aquel donde la función de transformación es una combinación lineal de las dos soluciones linealmente independientes a la misma ecuación de Schrödinger con paridad definida

$$u_T^{(i)}(E_q, r) = \alpha_1(E_q)u_e^{(i)}(E_q, r) + \beta_1(E_q)u_o^{(i)}(E_q, r),$$

y la derivada con respecto a la energía es de la forma

$$\partial_E u_T^{(i)}(q, r) = \alpha_2(E_q)u_e^{(i)}(E_q, r) + \beta_2(E_q)u_o^{(i)}(E_q, r) + \alpha_1(E_q)\partial_E u_e^{(i)}(E_q, r) + \beta_1(E_q)\partial_E u_o^{(i)}(E_q, r),$$

donde $\alpha_2 = \partial_E \alpha_1$ y $\beta_2 = \partial_E \beta_1$. El sistema creado tendrá pues seis parámetros, cuatro para la región interna y dos para la región externa. Las funciones transformadas que componen al nuevo sistema son

$$\begin{aligned}\psi_e^{(i)}(k, r) &= \frac{W[u_T^{(i)}(E_q, r), \partial_E u_T^{(i)}(E_q, r), u_e(E_k, r)]}{W[u_T^{(i)}(E_q, r), \partial_E u_T^{(i)}(E_q, r)]} = \frac{W_{ne}}{W_d} \\ \psi_o^{(i)}(k, r) &= \frac{W[u_T^{(i)}(E_q, r), \partial_E u_T^{(i)}(E_q, r), u_o(E_k, r)]}{W[u_T^{(i)}(E_q, r), \partial_E u_T^{(i)}(E_q, r)]} = \frac{W_{no}}{W_d}\end{aligned}$$

Mediante las mismas propiedades que se usaron en los casos con paridad definida, podemos evaluar los wronskianos correspondientes en el origen

$$\begin{aligned}W_{ne}|_{r=0} &= W[u_T^{(i)}(E_q, r), \partial_E u_T^{(i)}(E_q, r), u_e(E_k, r)]|_{r=0} \\ &= u_e^{(i)}(E_k, 0) \{ (E_q - E_k) u_e^{(i)}(E_q, 0) [(\alpha_2 \beta_1 - \alpha_1 \beta_2) \partial_r u_o^{(i)}(E_q, 0) - \alpha_1 \beta_1 \partial_E \partial_r u_o^{(i)}(q, 0)] \\ &\quad - \alpha_1 \beta_1 \partial_r u_o^{(i)}(E_q, 0) [(E_k - V(0)) \partial_E u_e^{(i)}(E_q, 0) + \partial_E \partial_r^2 u_e^{(i)}(E_q, 0)] \}\end{aligned}$$

$$W_{no}|_{r=0} = \alpha_1^2 [u_e^{(i)}(E_q, 0)]^2 \partial_r u_o^{(i)}(E_k, 0)$$

$$\begin{aligned}W_d|_{r=0} &= -\partial_r u_o^{(i)}(E_q, 0) [u_e^{(i)}(E_q, 0) (\alpha_2 \beta_1 - \alpha_1 \beta_2) \\ &\quad + \alpha_1 \beta_1 \partial_E u_e^{(i)}(E_q, 0)] + \alpha_1 \beta_1 u_e^{(i)}(E_q, 0) \partial_r \partial_E u_o^{(i)}(E_q, 0)\end{aligned}$$

Suponiendo que los valores de los parámetros son tales que $W_{ne}|_{r=0}$, $W_{no}|_{r=0}$ y $W_d|_{r=0}$ sean diferente de cero, entonces podemos construir la solución completa al nuevo sistema por medio de la combinación lineal

$$\psi^{(i)}(k, r) = A_i \psi_e^{(i)}(k, r) + B_i \psi_o^{(i)}(k, r),$$

y aplicando la condición a la frontera de un problema radial, podemos escribir

$$\psi^{(i)}(k, r) = A_i \left[\psi_e^{(i)}(k, r) - \frac{W_{ne}|_{r=0}}{W_{no}|_{r=0}} \psi_o^{(i)}(k, r) \right],$$

de esta forma, la función $\psi^{(i)}(k, r)$ es regular en el origen. La figura muestra un ejemplo de este caso, en donde el sistema inicial es el pozo radial

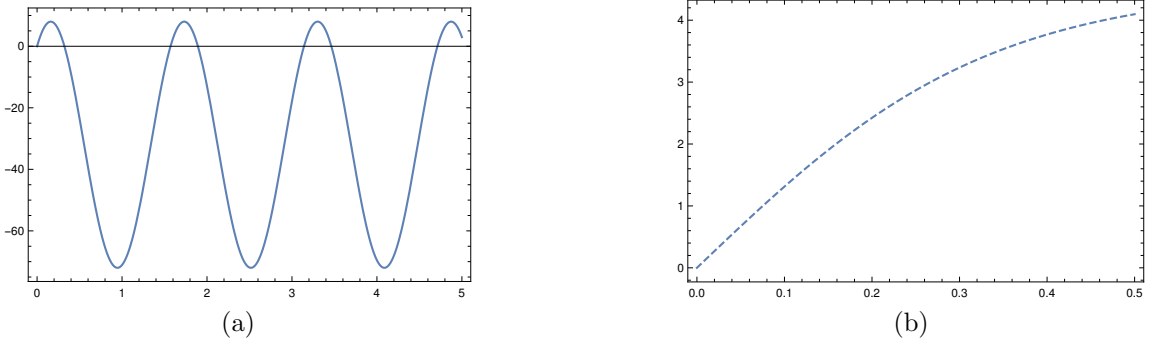


Figura 4.3: Potencial creados a partir la región de interacción de un pozo radial con profundidad 3 y una combinación lineal de sus soluciones linealmente independientes. Solucion (b) cerca del origen para los valores de parametros $\alpha_1 = 1$, $\beta_1 = 2$, $\alpha_2 = 3$, $\beta_2 = 4$

Por otro lado, partiendo de un potencial de la forma (??), su deformación por medio de la transformación de Darboux degenerada en la región interna es de la forma

$$V_2^{(i)}(r) = V^{(i)} - 2 \frac{(\partial_r W_d)^2 - W_d \partial_r^2 W_d}{W_d^2} \quad (4.14)$$

Donde se ha desarrollado la parte que contiene la deformación en términos del denominador en la expresión (4,9), con el fin de conocer lo que ocurre en el origen por medio de lo estudiado anteriormente, este comportamiento es de la forma

$$\lim_{r \rightarrow 0} V_2^{(i)}(r) \rightarrow \infty.$$

Esto sucede tanto en la versión regular como en la versión irregular de la transformación. Sin embargo, a pesar de que el potencial construido es singular en el origen, esta singularidad no es heredada por las soluciones, la figura (4,4) muestra dos potenciales creados a partir del oscilador armónico y una solución par e impar.

Ahora que ha sido satisfecha la condición a la frontera para un problema radial deformado por medio de la transformación degenerada de Darboux cuyo sistema de partida tiene características que cumplen tanto el pozo radial como el oscilador armónico truncado, podemos proceder a analizar el sistema de llegada de manera general, comenzando por construir la parte discreta del espectro.

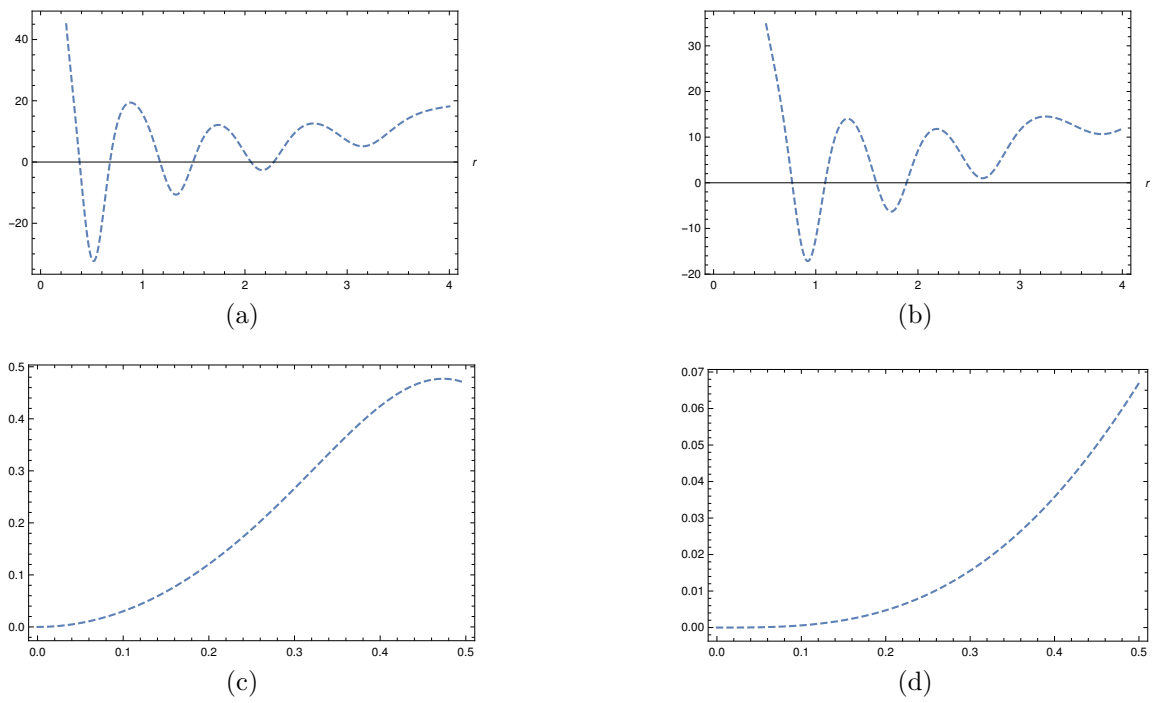


Figura 4.4: Potenciales creados a partir del oscilador armónico y una solución (a)par e (b) impar con sus respectivas soluciones (c) y (d)

4.2.2. Potencial radial Darboux - deformado

Partimos de un potencial de la forma

$$V_2 = \begin{cases} V_2^{(i)}(r) & r < R \\ 32q^2 \frac{\sin \theta - q(r+\gamma_0) \cos \theta}{\sin(2\theta) - 2q(r+\gamma_0)} \sin \theta & R < r \end{cases}, \quad (4.15)$$

donde $V^{(i)}$ es un potencial de la forma (4.14), es decir, es un potencial deformado por medio de la solución (4.10). Por otro lado, en la región externa, tenemos el potencial construido en la subsección anterior a partir del sistema de partícula libre.

De forma general, la función de onda completa es de la forma (4.9)

$$\psi_s(r) = \begin{cases} A_i \psi^{(i)}(k, r) & r < b \\ B_e \psi^+(k, r) + C_e \psi^-(k, r) & b < r. \end{cases}, \quad (4.16)$$

donde $\psi^{(i)}$ es construida a partir de (4.9), por lo que la regularidad en el origen está garantizada, mientras que ψ^\pm esta dada por (4.2). La expresión (4.16) permite obtener los estados ligados y de dispersión del sistema aplicando las condiciones a la frontera pertinentes.

4.2.3. Estados ligados

El comportamiento asintótico de 4.15 nos dice que los estados ligados se dan para valores de la energía $E < 0$, lo que implica un valor de k puramente imaginario, es decir, $k = i\kappa : \kappa \in \mathbb{R}$. La expresión asintótica de (4.16) toma la forma

$$\psi_s(r)|_{r \rightarrow \infty} = B_e e^{-\kappa r} + C_e e^{\kappa r} \quad (4.17)$$

por lo que si $\kappa > 0$, para que la función de onda sea de cuadrado integrable, el coeficiente C_e debe ser igual a cero. Además, como cualquier problema dividido en regiones, lo siguiente es garantizar la continuidad y diferenciabilidad de las eigenfunciones, lo cual se cumple mediante el par de ecuaciones

$$A_i \psi^{(i)}(i\kappa, b) = B_i \psi^+(i\kappa, b) \quad (4.18)$$

$$A_i \partial_r \psi^{(i)}|_{r=b, k=i\kappa} = B_i \partial_r \psi^+|_{r=b, k=i\kappa}. \quad (4.19)$$

El coeficiente A_i de ψ_s se deja como constante de normalización, mientras que B_e se obtiene mediante (4,19), quedando la función de onda de la forma

$$A_i \psi_s(r) = \begin{cases} \psi^{(i)}(i\kappa, r) & r < R \\ \frac{\psi^{(i)}(i\kappa, R)}{\psi^+(i\kappa, R)} \psi^+(i\kappa, r) & R < r \end{cases}$$

y al sustituir el valor de B_e en (4,19), se llega a la ecuación trascendental

$$W[\psi^{(i)}, \psi^+]_{r=R, k=i\kappa} = 0 \quad (4.20)$$

Al resolver (4,20) para $\kappa^2 = |E|$, se obtienen los valores de la energía para los cuales ψ_s es de cuadrado integrable, generando un espectro discreto correspondiente a los estados ligados. Al contar con esta parte del espectro el sistema construido es uno más completo que los propuestos en las secciones anteriores. En la siguiente sección se construirá el espectro continuo del sistema utilizando la forma general de la función de onda.

4.2.4. Espectro de dispersión

El caso del régimen de la dispersión está compuesto por los eigenvalores de la energía $k^2 = E > 0$ correspondientes a eigenfunciones acotadas dadas por (4,16), formando un espectro continuo. La continuidad y diferenciabilidad de las funciones es garantizada por las ecuaciones correspondientes

$$\begin{aligned} A_i \psi^{(i)}(k, R) &= [B_e \psi^+ + C_e \psi^-]_{r=R} \\ A_i \partial_r \psi^{(i)}|_{r=R} &= [B_e \partial_r \psi^+ + C_e \partial_r \psi^-]_{r=R} \end{aligned}$$

Las combinaciones lineales de funciones con la forma asintótica (4.3) cumplen con la siguiente simetría en sus coeficientes, siempre que la función en la región interna sea puramente real

$$B_e = -C_e^*, \quad B_e = A_i \frac{W[\psi^{(i)}, \psi^-]}{W[\psi^+, \psi^-]} \quad (4.21)$$

Ahora que se han construido las soluciones de la dispersión, se realizará un análisis de la solución de la dispersión correspondiente a el valor de la energía $k \rightarrow q$, el cual según el la forma asintótica del potencial puede corresponder a un estado ligado en el continuo.

4.2.5. Estado ligado en el continuo

De acuerdo al esquema de la transformación de Darboux, la solución asociada a la energía correspondiente a $E = q^2$ es mapeada al caso trivial, pero como se demostró al usar la transformación de Darboux degenerada para el caso de partícula libre, es posible realizar un análisis en el límite $k \rightarrow q$ mediante la introducción de un polo en dicho valor mediante la constante arbitraria. Sin embargo, debido a la forma de $\psi^{(i)}$, se cumple además que $\partial_k \psi^{(i)}|_{k=q} = 0$, por lo que el polo a introducir debe ser de segundo orden. En este caso se ha elegido que la función en la región interna sea de la forma

$$A\psi^{(i)} = A' \frac{\psi^{(i)}(k, r)}{\psi^{(i)}(k, R)},$$

esto debido a que el polo se comporta de la misma manera que $\psi^{(i)}(k, r)$ con respecto a k . Ya que hemos obtenido una forma adecuada para la función de onda, además de el valor de los coeficientes que hacen que la función de onda sea continua, ahora estamos en condiciones de realizar el análisis en $k \rightarrow q$, para lo cual es conveniente escribir la función de onda de la siguiente manera gracias a (4,21)

$$\psi_s(k, r) = A' \begin{cases} \frac{\psi^{(i)}(k, r)}{\psi^{(i)}(k, R)} & r < R \\ \frac{Im[W(\psi^{(i)}, \psi^-)_{r=R} \psi^-(k, r)]}{\psi^{(i)}(k, R) Im[\psi^+ \partial_r \psi^-]_{r=R}} & R < r \end{cases} \quad (4.22)$$

La introducción del polo permite el uso de la regla de L'Hopital en el límite deseado. Para la región de interna, la función toma la forma

$$\lim_{k \rightarrow q} A' \frac{\psi^{(i)}(k, r)}{\psi^{(i)}(k, R)} = A' \frac{\partial_k^2 \psi^{(i)}|_{k=q}}{\partial_k^2 \psi^{(i)}|_{k=q, r=R}}$$

Por otro lado, en la región $R < r$ al observar el comportamiento de ψ^\pm en el límite

$$\operatorname{Im}[\psi^\pm]_{k=q} = 0 \implies \operatorname{Im}[\psi^+ \partial_r \psi^-]_{k=q} = 0$$

podemos notar que la presencia del polo provoca que el cero tanto en el numerador como en el denominador en (4.22) para $b < r$ sean de cuarto orden. Como consecuencia, en este caso la regla de L'Hopital debe ser usada en cuatro ocasiones. Después de este procedimiento, debido a la complejidad de la expresión resultante, es más conveniente analizar el numerador y denominador por separado

$$\lim_{k \rightarrow q} A' \frac{\operatorname{Im}[W(\psi^{(i)}, \psi^-)_{r=b} \psi^-(k, r)]}{\psi^{(i)}(k, r)|_{r=b} \operatorname{Im}[\psi^+ \partial_r \psi^-]_{r=b}} = \frac{f_n(q, b, r)}{f_d(q, b, r)}.$$

Donde el numerador es de la forma

$$\begin{aligned} f_n(q, R, r) &= W \{ \partial_k^2 \psi^{(i)}(k, r), \operatorname{Re}[\psi^+(k, r)] \}_{k=q, r=R} g_1(q, r) \\ &+ 2W \{ \partial_k^2 \psi^{(i)}(k, r), \partial_k \operatorname{Im} [\psi^+(k, r)] \}_{k=q, r=R} g_2(q, r) \\ &+ \frac{2}{\gamma_0} W \{ \partial_k^2 \psi^{(i)}(k, r), \partial_k \operatorname{Re} [\psi^+(k, r)] \}_{k=q, r=R} g_3(q, r) \\ &+ W \{ \partial_k^2 \psi^{(i)}(k, r), \partial_k^2 \operatorname{Im} [\psi^+(k, r)] \}_{k=q, r=R} g_3(q, r). \end{aligned}$$

mientras que las funciones $g_i(q, r)$, están dadas por

$$\begin{aligned} g_1(q, r) &= \frac{(2 \sin qr - 2r) \sin [2(qr + \delta)] - 2q(qr(3r + 4\gamma_0) \cos qr + qr^2 \cos [2(qr + \delta)] + 2\gamma_0 \sin qr)}{\sin 2qr - 2q(r + \gamma_0)} \\ g_2(q, r) &= 2q \frac{q(r + 2\gamma_0) \cos qr + qr \cos [2(qr + \delta)] - 2 \cos \delta \sin (qr + \delta)}{-2q(\gamma_0 + r) + \sin [2(qr + \gamma_0)]}, \\ g_3(q, r) &= \frac{2q \sin (qr + \delta)}{\sin [2(qr + \delta)] - 2q(r + \gamma_0)}. \end{aligned}$$

y su comportamiento asintótico es de la forma

$$\begin{aligned}
\lim_{r \rightarrow \infty} g_1(q, r) &\rightarrow qr[\cos qr + 3 \cos (qr + \delta)], \\
\lim_{r \rightarrow \infty} g_2(q, r) &\rightarrow -q[\cos qr + \cos (qr + \delta)], \\
\lim_{r \rightarrow \infty} g_3(q, r) &\rightarrow 0.
\end{aligned}$$

Entonces, para obtener una función de cuadrado integrable (para el caso $\delta = 0$), es necesario que los coeficientes que acompañan a g_1 y g_2 sean igual a cero. Tomando en cuenta que

$$[\operatorname{Re}[\psi^\pm(k, r)]]_{k=q} = \gamma_0 [\partial_k \operatorname{Im}[\psi^+(k, r)]]_{k=q} = g_3(q, r), \quad (4.23)$$

Ambos coeficientes se anulan si la siguiente ecuación se satisface

$$W[\partial_k^2 \psi^{(i)}(k, r), g_3(q, r)]_{k=q, r=R} = 0$$

Esta ecuación puede ser vista como un análogo de la condición de cuantización para los estados ligados convencionales, en el sentido que los parámetros de la región de interacción deformada definen el valor de la energía para el cual puede existir un estado ligado en el continuo, teniendo inclusive una forma similar a (3.7).

Por otro lado, el denominador es de la forma

$$\begin{aligned}
f_d(q, R, r) &= 12 \left\{ \partial_k^2 \psi^{(i)}(k, r) W [\partial_k \operatorname{Im}[\psi^+(k, r)], \partial_k \operatorname{Re}[\psi^+(k, r)]] \right\}_{k=q, r=R} \\
&= 6 \left\{ \partial_k^2 \psi^{(i)}(k, r) W [\partial_k^2 \operatorname{Im}[\psi^+(k, r)], \operatorname{Re}[\psi^+(k, r)]] \right\}_{k=q, r=R}
\end{aligned}$$

Lo único que tenemos que cuidar entonces es que los ceros de esta expresión sean compensados con los ceros de f_n . Una vez garantizada la posibilidad de construir un sistema que admita la existencia de un estado ligado en el continuo, se estudiará la naturaleza de éste mediante la perturbación del potencial a través de la introducción de una delta de Dirac fuera de la región interna

4.2.6. Perturbación delta

Para observar la naturaleza de el estado ligado en el continuo, se perturba el potencial construido en las subsecciones anteriores con una delta de Dirac en un punto $r = a$.

$$V_p(r) = \begin{cases} V_2^{(i)}(r) & r < R \\ 32q^2 \frac{\sin \theta - q(r+\gamma_0) \cos \theta}{\sin(2\theta) - 2q(r+\gamma_0)} \sin \theta + \delta(r - a) & R < r \end{cases}, \quad (4.24)$$

El sistema resultante se puede analizar en tres regiones, donde la función de onda en $r < a$ es igual a la del sistema sin perturbar, dada por (4,16), con los coeficientes (4,21) para la región intermedia.

$$\psi_{sp}(r) = \begin{cases} A_i \psi^{(i)} & r < R \\ B_e \psi^+ + C_e \psi^- & R < r < a, \\ B_p \psi^+ + C_p \psi^- & a < r \end{cases}, \quad (4.25)$$

Lo único que resta es garantizar la continuidad en $r = a$. La primera condición surge de exigir que la función sea univaluada, mientras que la segunda se da al integrar la ecuación de Schrödinger de $r = a - \epsilon$ a $r = a + \epsilon$, donde $\epsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} B_e \psi^+(a) + C_e \psi^-(a) &= B_p \psi^+(a) + C_p \psi^-(a) \\ [B_e \partial_r \psi^+ + C_e \partial_r \psi^- + \frac{\lambda}{a}(B_e \psi^+ + C_e \psi^-)]_{r=a} &= [B_p \partial_r \psi^+ + C_p \partial_r \psi^-]_{r=a} \end{aligned}$$

Los coeficientes de la tercera región quedan de la forma

$$\begin{aligned} B_p &= B_e - \lambda \psi^-(a) \frac{B_e \psi^+(a) + C_e \psi^-(a)}{aW[\psi^+, \psi^-]_{r=R}} \\ C_p &= C_e + \lambda \psi^+(a) \frac{B_e \psi^+(a) + C_e \psi^-(a)}{aW[\psi^+, \psi^-]_{r=R}} \end{aligned}$$

Una vez más los coeficientes cumplen con la simetría la $B_p = -C_p^*$, la cual es útil para llevar a cabo el análisis del sistema, ya que entonces el factor de dispersión S y

por lo tanto el corrimiento de fase ϕ están dados por

$$S(k) = \frac{B_p}{B_p^*} = e^{2i\phi} \implies \phi = \text{Arg}(B_p)$$

Ya que la información requerida se obtiene a través de obtener los polos de S , o de forma equivalente los ceros de B_p (condición de onda puramente saliente). A partir de esta condición, podemos construir una "función de seguimiento de la resonancia" de la forma

$$f_s(\lambda) = \begin{cases} x = \text{Re}[k(\lambda)] \\ y = \text{Im}[k(\lambda)] \end{cases}$$

donde

$$k(\lambda) : B_p(k, \lambda) = 0, \text{Im}[k(\lambda)] < 0.$$

La condición de onda puramente saliente nos permite conocer los valores de k en las cuales el corrimiento de fase incrementa abruptamente, es decir, una resonancia. Por medio de la gráfica de f_s , podremos observar que

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} f_s(\lambda) = \begin{cases} x = q \\ y = 0 \end{cases}$$

Donde en el límite $\lambda \rightarrow 0$ se encuentra el sistema sin perturbar, que es el potencial del tipo von Neumann Wigner. Por lo tanto, ya que la parte real de la condición de onda saliente x es igual a la energía de la resonancia y la parte imaginaria y es el inverso de su tiempo de vida, podemos concluir que el estado ligado en el continuo no es más que una resonancia con un tiempo de vida infinito.

Además, la condición de cuantización (4.2.5) permite también construir una función de seguimiento por medio de la variación de la condición de onda saliente dada por (4.21). Es decir

$$f_s(R) = \begin{cases} x = \text{Re}[k(R)] \\ y = \text{Im}[k(R)] \end{cases}$$

donde

$$k(R) : B_e(k, R) = 0, \operatorname{Im}[k(R)] < 0.$$

En este caso, se espera el siguiente comportamiento para el estado ligado en el continuo

$$\lim_{R \rightarrow R_0} f_s(R) = \begin{cases} x = q \\ y = 0 \end{cases}$$

donde $R = R_0$ satisface (4.2.5). Debido a la complejidad de las expresiones para la condición de onda saliente. Encontrar sus respectivas raíces de forma genral no es posible, al menos de manera analítica, por lo que es necesario resolver cada sistema en específico por medio de herramientas computacionales. Esto se realizará en las subsecciones posteriores por medio de tres ejemplos.

Como primer ejemplo, podemos realizar la perturbación del sistema de partícula libre deformado, que aunque no está dividido en regiones es posible observar lo que ocurre al variar el parámetro δ , para el cual sabemos que hay un estado ligado en el continuo para $\delta = 0$. La función de seguimiento es de la forma

$$f_s(\delta) = \begin{cases} x = \operatorname{Re}[k(\delta)] \\ y = \operatorname{Im}[k(\delta)] \end{cases}$$

donde

$$k(\delta) : B_e(k, \delta) = 0, \operatorname{Im}[k(\delta)] < 0.$$

En este caso, se espera el siguiente comportamiento para el estado ligado en el continuo

$$\lim_{\delta \rightarrow 2n\pi} f_s(R) = \begin{cases} x = q \\ y = 0 \end{cases}.$$

El estado ligado en el continuo se da para los valores $\delta = 2n\pi$ debido a que δ toma el papel de una fase en la periodicidad tanto del potencial como de las funciones de

onda.

4.3. Pozo radial

Como primer ejemplo, tomamos como sistema inicial uno donde la región de interacción esta dada por una constante $-V_0$, es decir, un pozo radial

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < R \\ 0 & R < r \end{cases}.$$

Podemos escribir su correspondiente ecuación de Schrödinger para la región interna de la forma

$$-\frac{d^2 u^{(i)}}{dr^2} = (k^2 + V_0)u^{(i)}, \quad E = k^2$$

cuya solución general es de la forma

$$u^{(i)}(k, r) = A_i \sin(\sqrt{k^2 + V_0}r) + B_i \cos(\sqrt{k^2 + V_0}r)$$

La función de onda completa que cumple la condición a la frontera $u^{(i)}(k, 0) = 0$ es

$$u(k, r) = \begin{cases} A_i \sin(\sqrt{k^2 + V_0}r) & r < R \\ A_e e^{ikr} + B_e e^{-ikr} & R < r \end{cases}$$

En la siguiente subsección, usaremos la función $u^{(i)}$ para obtener el espectro discreto del sistema.

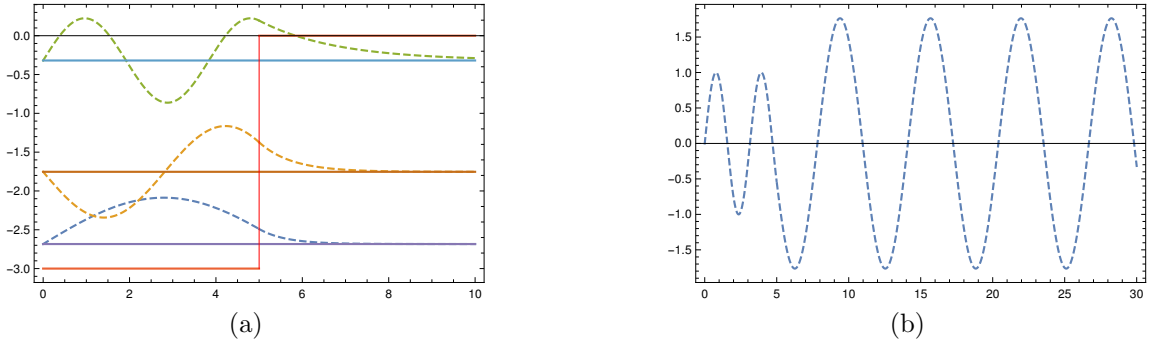
4.3.1. Estados ligados

Sustituyendo el valor de $u^{(i)}$ de (4.3) en las expresión para la función de onda (3.4)

$$u(k, r) = A_i \begin{cases} \sin(\sqrt{V_0 - \kappa^2}r) & r < R \\ \sin(\sqrt{V_0 - \kappa^2}R)e^{-\kappa(r-R)} & R < r \end{cases}.$$

Cuadro 4.1: Espectro discreto del pozo radial con ancho $R = 5$ y profundidad $V_0 = 3$.

Estados Ligados	Energía
Estado base	-2.68393
Primer estado excitado	-1.75337
Segundo estado excitado	-0.319356

Figura 4.5: (a) Pozo radial (línea sólida) para $R = 5$, $V_0 = 3$ y sus correspondientes estados ligados (línea punteada). (b) Estado de dispersión correspondiente a $k = 1$.

,
mientras que la regla de cuantización es

$$\sqrt{V_0 - \kappa^2} \cos(\sqrt{V_0 - \kappa^2} R) + \kappa \sin(\sqrt{V_0 - \kappa^2} R) = 0 \quad (4.26)$$

La figura 4.6 muestra un pozo radial construido para valores específicos de V_0 y R con sus correspondientes estados ligados, cuyos valores se muestran en la tabla 4.1

4.3.2. Estados de dispersión.

Para el espectro de dispersión, lo único que necesitamos es obtener el valor de las constantes de continuidad por medio de la fórmula (4.21) para obtener la función de onda completa

$$u(k, r) = A \begin{cases} \sin(\sqrt{k^2 + V_0} r) & r \leq R \\ B e^{i k r} + C e^{-i k r} & R \leq r \end{cases}$$

$$-C^* = B = e^{-ikR}[k \sin(\sqrt{k^2 + V_0}R) - i\sqrt{k^2 + V_0} \cos(\sqrt{k^2 + V_0}R)]$$

La figura muestra la gráfica de la función de onda para el estado de dispersión correspondiente al valor de la energía $k = 1$. Procedemos a deformar el sistema por medio de la versión degenerada de la transformación de Darboux degenerada

4.3.3. Sistema deformado

Para la región de interacción, la función de transformación impar y su derivada con respecto a la energía están dadas por

$$\begin{aligned} u^{(i)}(q, r) &= \sin(\sqrt{q^2 + V_0}r) \\ \partial_q u^{(i)}(q, r) &= \frac{q}{\sqrt{q^2 + V_0}} r \cos(\sqrt{q^2 + V_0}r), \end{aligned}$$

El potencial deformado está dado entonces por la expresión analítica

$$V_2(r) = \begin{cases} -V_0 - 32Q^2 \frac{Qr \cos(Qr) - \sin(Qr)}{(\sin(2Qr) - 2Qr)^2} \sin(Qr) & r < R \\ 32q^2 \frac{[\sin(qr) - q(r + \gamma_0) \cos(qr)] \sin(qr)}{[\sin(2qr) - 2q(r + \gamma_0)]^2} & R < r \end{cases}, \quad Q^2 = q^2 + V_0,$$

la figura ?? muestra la gráfica de este potencial así como su discontinuidad en el punto de corte

La función de onda deformada para esta región es entonces

$$\begin{aligned} \psi^{(i)}(k, r) &= \frac{\sin(Kr)[(K^2 + Q^2) \sin(2Qr) - 2(k^2 - q^2)Kr] - 4KQ \cos(Kr) \sin^2(Qr)}{2Qr - \sin(2Qr)}, \\ K^2 &= k^2 + V_0, \quad Q^2 = q^2 + V_0 \end{aligned}$$

Los estados ligados y estados de dispersión del sistema deformado se muestran en la figura

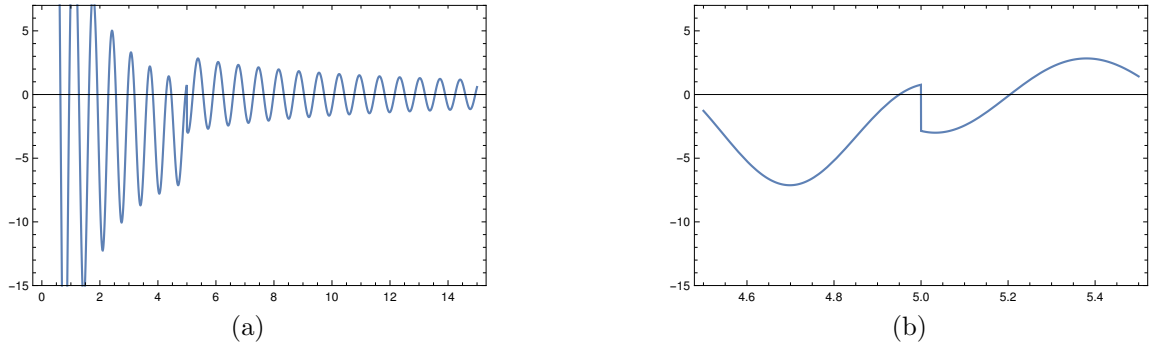


Figura 4.6: (a) Pozo radial para $R = 5$, $V_0 = 3$ y sus correspondiente discontinuidad en el punto de corte.

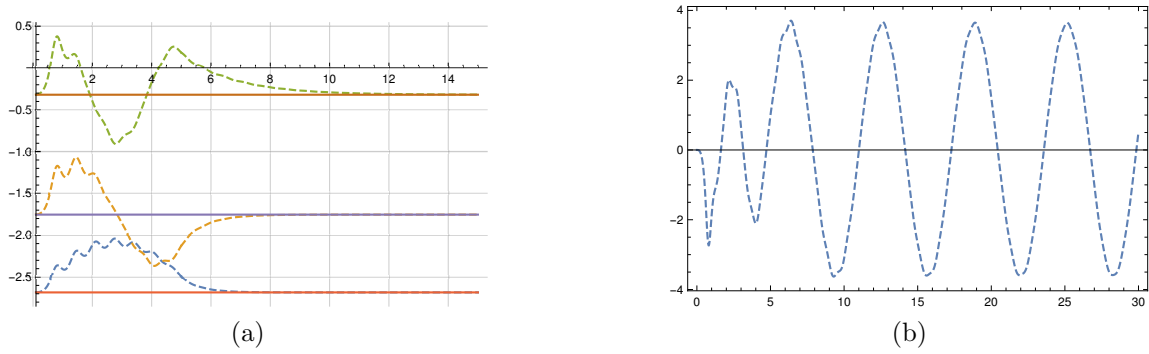


Figura 4.7: (a) Estados ligados (línea punteada). (b) Estado de dispersión correspondiente a $k = 1$ para el pozo radial deformado por medio de la transformación de Darboux degenerada para $\delta = 0$, $\gamma_0 = 1$, $V_0 = 3$, $R = 5$.

4.4. Oscilador armónico truncado

Como sistema inicial, se toma un oscilador armónico truncado cuyo umbral se encuentra en $V(r) = 0$ y con punto de corte $r = R$

$$V(r) = \begin{cases} r^2 - R^2 & r < R \\ 0 & R < r \end{cases} \quad (4.27)$$

En la región de interna, tenemos un oscilador armónico con un offset R , por lo que la ecuación de Schrödinger se puede escribir de la forma

$$-\frac{d^2 u^{(i)}}{dr^2} + r^2 u^{(i)} = (k^2 + R^2) u^{(i)}, \quad k^2 = E$$

La forma más popular de resolver este tipo de sistemas es mediante el método de factorización, pues permite obtener de forma sencilla los estados ligados. Sin embargo, como en este caso el truncamiento genera un espectro que incluye un régimen continuo, es más conveniente realizar un mapeo a una ecuación hipergeométrica confluyente, cuya solución es de la forma

$$u^{(i)}(k, r) = A_i {}_1F_1 \left(a_k, \frac{1}{2}; r^2 \right) e^{-\frac{r^2}{2}} + B_i {}_1F_1 \left(a_k + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; r^2 \right) r e^{-\frac{r^2}{2}}, \quad a_k = \frac{1 - k^2 - R^2}{4} \quad (4.28)$$

Donde la dependencia con respecto a la energía está contenida en el primer parámetro de ${}_1F_1$, conocida como la función hipergeométrica confluyente

$${}_1F_1(a, b; r^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} \frac{r^{2n}}{n!}, \quad (a)_n = \begin{cases} 1 & a = 0 \\ \prod_{k=0}^{n-1} a + k & a \neq 0 \end{cases},$$

Ya que se ha obtenido la función de onda para la región interna, se usará el método visto en la sección anterior en este sistema, empezando por construir los estados ligados correspondientes al potencial de partida.

Cuadro 4.2: Espectro discreto del oscilador armónico truncado para $R = 4$.

Estados Ligados	Energía
Estado base	-12.999
Primer estado excitado	-9.000
Segundo estado excitado	-5.005

4.4.1. Estados ligados

Siguiendo la metodología discutida en la sección anterior, la función de onda completa para los estados ligados correspondientes al oscilador armónico truncado (4.27), es

$$u(r) = A \begin{cases} {}_1F_1\left(a_\kappa, \frac{3}{2}; r^2\right) r e^{-\frac{r^2}{2}} & r < R \\ {}_1F_1\left(a_\kappa, \frac{3}{2}; b^2\right) R e^{R(\kappa - \frac{R}{2})} e^{-\kappa r} & R < r \end{cases}$$

donde $k^2 = E < 0 : k = i\kappa, \kappa > 0$.

Mientras que la condición de cuantización esta dada por la ecuación trascendental

$$\frac{(3 + \kappa^2 - R^2)R^2}{3} {}_1F_1\left(a + 1, \frac{5}{2}; R^2\right) - (R^2 - b\kappa - 1) {}_1F_1\left(a, \frac{3}{2}; R^2\right) = 0.$$

Esta ecuación es complicada de resolver analíticamente, por lo que es más conveniente buscar las raíces de forma numérica. La tabla 4.2 muestra el espectro discreto (4.4.1) para un valor específico del punto de corte R , mientras que la figura 4.8 muestra dicho potencial y sus tres estados ligados. En la siguiente sección el espectro de dispersión será analizado.

4.4.2. Estados de dispersión

Si nos restringimos a los valores de $k^2 = E > 0$, y después de aplicar las condiciones de continuidad en el punto de corte, obtenemos las soluciones de la dispersión. La figura 4.8 muestra la función de onda para el estado de la dispersión correspondiente a la energía $k = 1$.

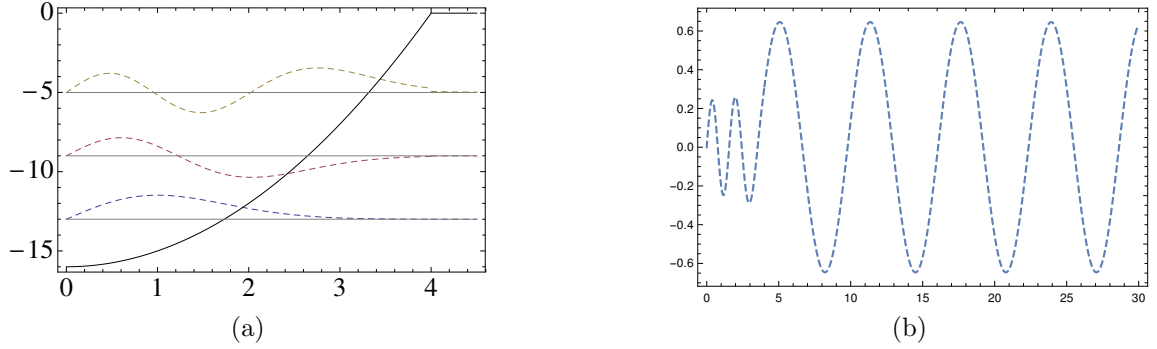


Figura 4.8: (a) Oscilador armónico truncado (línea sólida) para $R = 4$ y sus correspondientes estados ligados (línea punteada). (b) Estado de dispersión correspondiente a $k = 1$.

$$u(r) = A \begin{cases} {}_1F_1(a, 3/2; r^2) r e^{-r^2/2}, & r \leq R \\ D(k, R) e^{ikr} + D^*(k, R) e^{-ikr}, & R < r \end{cases} \quad (4.29)$$

donde,

$$D(k) = \frac{A}{6k} e^{-\frac{1}{2}R(R+2ik)} \left\{ 3[i(R^2 - 1) + Rk^2] {}_1F_1\left(a_k, \frac{3}{2}; R^2\right) + iR^2(k^2 + R^2 - 3) {}_1F_1\left(a_k + 1, \frac{5}{2}; R^2\right) \right\}$$

Ahora que hemos obtenido el espectro de dispersión, podemos utilizar una de estas soluciones como semilla para obtener un nuevo sistema por medio de la transformación de Darboux degenerada

4.4.3. Oscilador armónico truncado deformado

De acuerdo a el esquema planteado en la sección 3 y la forma de los estados de dispersión obtenida en esta sección, la función de transformación a utilizar para la transformación del oscilador armónico truncado debe ser de la forma

$$u_T(r) = \begin{cases} A_i {}_1F_1\left(a_q, \frac{3}{2}; r^2\right) r e^{-\frac{r^2}{2}}, & r \leq R \\ A_e \sin[qr + \delta], & R < r \end{cases} \quad (4.30)$$

donde,

$$a_q = \frac{3 - q^2 - R^2}{4} \quad (4.31)$$

Ya que sólo necesitamos transformar la región interna, se requiere la derivada de la función hipergeométrica confluyente respecto al primer argumento, pues en éste está contenida la dependencia con respecto a la energía. Con este fin, podemos escribir dicha función en forma de serie

$${}_1F_1(a_q, 3/2; r^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_q)_n}{(3/2)_n} \frac{r^{2n}}{n!}.$$

Lo único que resta entonces es obtener la derivada $(a)_n$, conocido como símbolo de Pochhammer *citar* o factorial descendiente. Esta derivada tiene la forma

$$\frac{d}{da}(a)_n = (a)_n \left[\frac{\Gamma'(a+n)}{\Gamma(a+n)} - \frac{\Gamma'(a)}{\Gamma(a)} \right]$$

donde $\Gamma(a)$ es la función gamma. Por lo tanto, la derivada de la función hipergeométrica confluyente con respecto a la energía es

$$\frac{d}{dq} {}_1F_1(a_q, 3/2; r^2) = \frac{da_q}{dq} \left\{ -\frac{\Gamma'(a_q)}{\Gamma(a_q)} {}_1F_1(a_q, 3/2; r^2) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma'(a_q+n)}{\Gamma(a_q+n)} \frac{(a_q)_n}{(3/2)_n} \frac{r^{2n}}{n!} \right\},$$

ya que el primer término en los corchetes es proporcional a la misma función hipergeométrica, no contribuye al cálculo del nuevo sistema. Usando la formula para obtener el potencial deformado, en la región interna éste está dado por la expresión analítica

$$V^{(i)}(r) = r^2 - R^2 + 4 + \frac{4}{r^2} - 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_q)_n \Gamma'(a_q+n)}{(3/2)_n \Gamma(a_q+n) n!} \frac{d^2}{dr^2} \ln \left\{ W \left[{}_1F_1 \left(a_q, \frac{3}{2}, r^2 \right), r^{2n} \right] \right\}.$$

podemos observar que la singularidad en el origen está contenida en el cuarto término del lado derecho. La figura 4.10 muestra este potencial, así como su discontinuidad en el punto de corte. Lo siguiente es obtener las soluciones asociadas a la región interna del potencial, la cual está dada por la expresión analítica

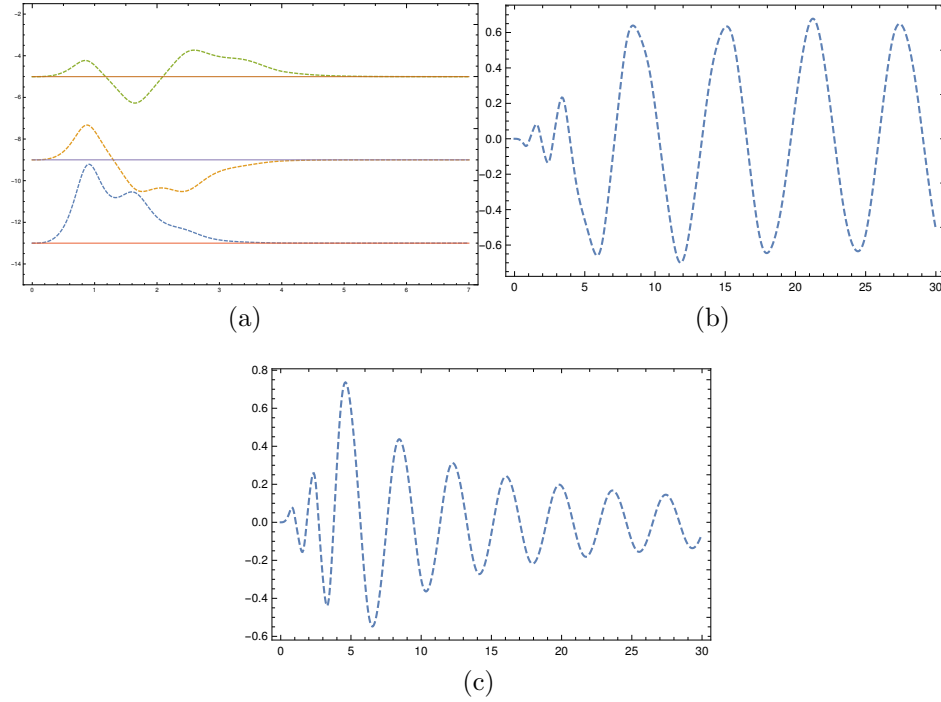


Figura 4.9: (a) Scattering state of the Darboux deformed system for $k=1$, $b=4$, $q=1.65996$, $\delta = 0$, $\gamma_0 = 1$. (b) The bound state in the continuum for the eigenvalue $k = q = 1,65996$.

$$\psi^{(i)}(k, r) = r e^{-\frac{r^2}{2}} \frac{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a_q)_m \Gamma'(a_q+m)}{(3/2)_m \Gamma(a_q+m) m!} W \left[{}_1F_1 \left(a_q, \frac{3}{2}, r^2 \right), r^{2m}, {}_1F_1 \left(a_k, \frac{3}{2}, r^2 \right) \right]}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_q)_n \Gamma'(a_q+n)}{(3/2)_n \Gamma(a_q+n) n!} W \left[{}_1F_1 \left(a_q, \frac{3}{2}, r^2 \right), r^{2n} \right]}. \quad (4.32)$$

Finalmente, podemos sustituir (4.32) en (4.22) y usar los métodos vistos en la sección anterior para obtener el espectro completo del sistema deformado, incluyendo un estado ligado en el continuo, lo que se muestra en la figura (4.9)

Cabe resaltar que la regla de cuantización del sistema deformado es la misma que la del sistema inicial, lo que se muestra en la figura (??)

Por otro lado, el corrimiento de fase para el sistema perturbado se muestra en la figura ??, donde se puede observar un incremento abrupto cerca de la energía del estado ligado en el continuo

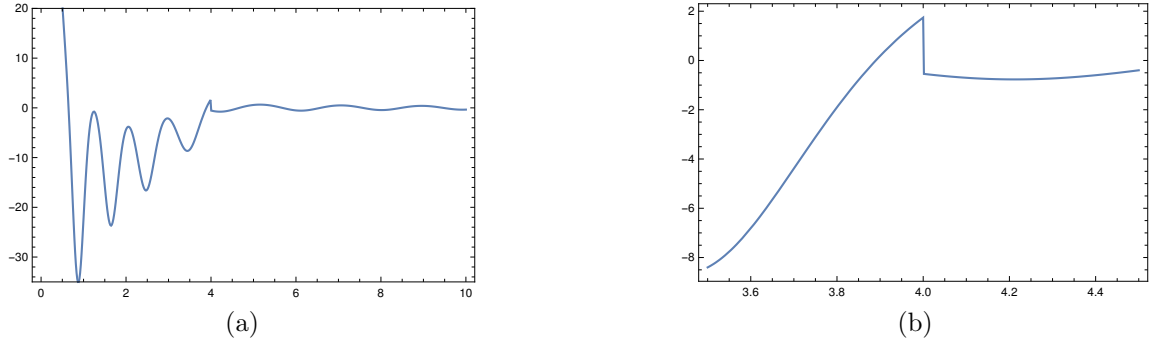


Figura 4.10: (a) Potencial Darboux - deformado para $q = 1,65996$ y valores de los parámetros $b = 4$, $\delta = 0$ y $\gamma_0 = 1$. (b) Discontinuidad del potencial en el punto de corte.

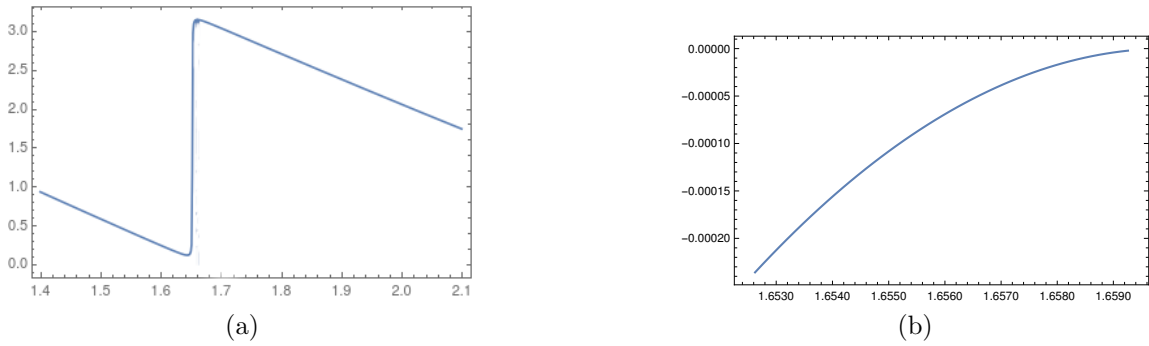


Figura 4.11: (a) Corrimiento de fase para un oscilador armónico truncado deformado perturbado con $R = 4$, $\delta = 0$, $\gamma_0 = 1$. (b) Seguimiento de la resonancia para el sistema perturbado desde $\lambda = 1$ a $\lambda = 0$

4.5. Deformación parcial

Ya que la definición del potencial de von Neumann - Wigner esta contenida en el comportamiento asintótico, la región interna no es relevante en este sentido. Por esta razón, en la presente sección se estudiará lo que ocurre al realizar la transformación de Darboux sólo en la región $R < r$.

$$V(r) = \begin{cases} V^{(i)}(r) & r < R \\ 32q^2 \frac{[\sin(qr) - q(r+\gamma_0)\cos(qr)]\sin(qr)}{[\sin 2(qr) - 2q(r+\gamma_0)]^2} & R < r \end{cases},$$

En este caso $V_{<}(r)$ es un potencial cuyas soluciones a la ecuación de Schrödinger son conocidas pero no provienen de la transformación de Darboux. Por ejemplo, para el caso del oscilador armónico truncado $V_{<}(r) = r^2$. La función de onda completa en este caso es de la misma forma que (4,16) donde denotamos a la función en la región interna como $u^{(i)}$ para diferenciarla del caso de la transformación de Darboux completa

$$\psi_s(r) = \begin{cases} A_i u^{(i)}(k, r) & r < R \\ B_e \psi^+ + C_e \psi^- & R < r \end{cases}, \quad (4.33)$$

Siguiendo el mismo proceso de secciones anteriores, podemos obtener el valor de los coeficientes B_e y C_e para posteriormente escribir ψ_s de manera conveniente

$$\psi_s(r) = A_i \begin{cases} u^{(i)}(k, r), & r < R \\ \frac{\text{Im}\{W[(k, r), \psi^+(k, r)]_{r=R} \psi^-(k, r)\}}{\text{Im}\{[\psi^-(k, r) \frac{d}{dr} \psi^+(k, r)]_{r=R}\}}, & R < r \end{cases}, \quad (4.34)$$

Ya que el potencial tiene la forma asintótica (??), el posible estado ligado en el continuo se encuentra en el eigenvalor $E = q^2$, es decir, la energía correspondiente a la función de transformación para la región asintótica. Una vez más, podemos realizar el análisis en el límite $\sqrt{E} = k \rightarrow q$. La principal diferencia con respecto a lo realizado en las secciones anteriores, es que la función de onda en la región interna es diferente al caso trivial en dicho eigenvalor

$$u^{(i)}(q, r) \neq 0$$

Por lo tanto, no es necesaria la introducción de un polo a través de la variable A_i

$$\lim_{k \rightarrow q} A_i u^{(i)}(k, r) = A_i u^{(i)}(q, r)$$

Para la región $r < R$, por las propiedades (4,23), podemos usar la regla de L'Hopital en el límite $k \rightarrow q$, en donde la ausencia del polo provoca que sólo se deba usar la regla dos veces. Sin embargo, el límite es de la misma forma, exceptuando el cambio del término $\partial_k^2 \psi^{(i)}|_{k=q}$ por $u^{(i)}(q, R)$.

$$\lim_{k \rightarrow q} \frac{\text{Im} \left\{ W \left[u^{(i)}(k, r), \psi^+(k, r) \right]_{r=R} \psi^-(k, r) \right\}}{\text{Im} \left\{ \left[\psi^-(k, r) \frac{d}{dr} \psi^+(k, r) \right]_{r=R} \right\}} = \frac{f_n(q, R, r)}{f_d(q, R, r)},$$

$$\begin{aligned} f_n(q, R, r) &= W \left\{ u^{(i)}(k, r), \text{Re}[\psi^+(k, r)] \right\}_{k=q, r=R} g_1(q, r) \\ &+ 2 W \left\{ u^{(i)}(k, r), \partial_k \text{Im} [\psi^+(k, r)] \right\}_{k=q, r=R} g_2(q, r) \\ &+ \frac{2}{\gamma_0} W \left\{ u^{(i)}(k, r), \partial_k \text{Re} [\psi^+(k, r)] \right\}_{k=q, r=R} g_3(q, r) \\ &+ W \left\{ u^{(i)}(k, r), \partial_k^2 \text{Im} [\psi^+(k, r)] \right\}_{k=q, r=R} g_3(q, r). \end{aligned}$$

Por lo tanto, la regla de cuantización en este caso es

$$W[u^{(i)}(q, r), g_3(q, r)]_{r=R} = 0$$

La figura (4,12) muestra el potencial creado por la transformación de Darboux parcial del oscilador armónico, la función de onda correspondiente al estado ligado en el continuo, su corrimiento de fase y el seguimiento de la correspondiente resonancia

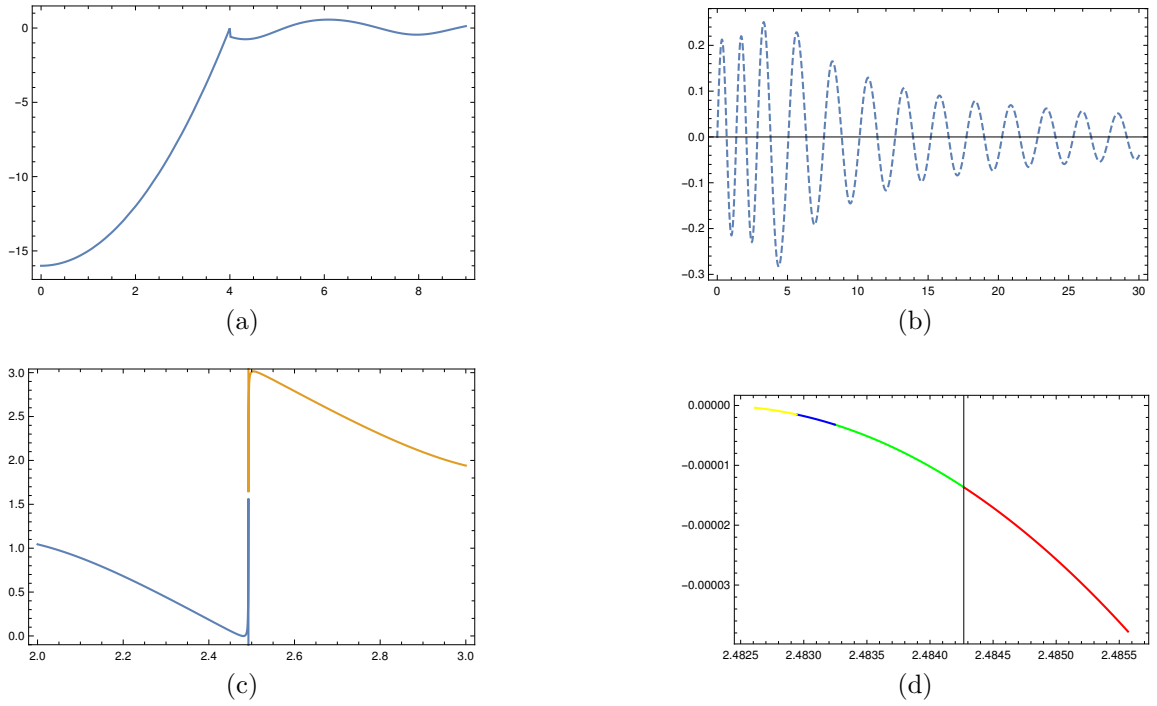


Figura 4.12: (a) Potencial Darboux - deformado parcialmente para $q = 2,482279782872165$ y valores de los parámetros $b = 4$, $\delta = 0$ y $\gamma_0 = 1$. (b) Estado ligado en el continuo correspondiente al potencial (c) Corrimiento de fase correspondiente a la resonancia del sistema perturbado para $\lambda = 1$. Seguimiento de la resonancia para el sistema perturbado de $\lambda = 0,1$ a $\lambda = 1$

Capítulo 5

Resonancias en mecánica cuántica

5.1. Corrimiento de fase

El corrimiento de fase es una variable en los sistemas cuánticos tridimensionales, que permite obtener información acerca de un proceso de dispersión. Esta variable se puede obtener a partir de proponer la forma asintótica para una función de onda en coordenadas esféricas

$$\psi_{\infty} = A \left[e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right].$$

En este caso, el primer término en los corchetes representa la onda incidente, mientras el segundo término representa la onda dispersada, por lo que f es entonces la amplitud de la dispersión

Capítulo 6

Conclusiones

Bibliografía

- [1] D. Zill y W. Wright. *Ecuaciones diferenciales con problemas con valores a la frontera*. Cengage learning.