

ECUACIÓN UNIDIMENSIONAL DE SCHRÖDINGER COMO UN PROBLEMA DINÁMICO CLÁSICO

Sanjinés C.D.

*Instituto de Investigaciones Físicas
Universidad Mayor de San Andrés
La Paz-Bolivia*

RESUMEN

Se presenta una analogía pedagógica entre dos problemas definidos en diferentes áreas de la física: en la mecánica cuántica, la determinación del espectro energético para potenciales espaciales unidimensionales periódicos y localizados; en la mecánica clásica, las condiciones de estabilidad para un sistema dinámico bajo la influencia de fuerzas elásticas atractivas y repulsivas. En ambos casos, se definen matrices (matriz de transferencia y matriz de evolución respectivamente) cuya traza determina las condiciones bajo las cuales se puede resolver el problema cuántico espectral o el problema dinámico de estabilidad; para ello es necesario que el valor de dicha traza se encuentre en el intervalo $[-2, 2]$. Esta técnica se ilustra para varios casos sencillos de potenciales espaciales periódicos y localizados, logrando reproducir resultados conocidos de una manera compacta y directa.

1. INTRODUCCIÓN

La ecuación unidimensional de Schrödinger se puede estudiar desde una perspectiva muy interesante (y relativamente poco usual en la literatura) que ofrece la ventaja pedagógica de relacionar dos campos conceptualmente diferentes de la física, como son la mecánica cuántica y la mecánica clásica. Así, el objetivo de este trabajo es mostrar cómo se pueden relacionar ambos campos a través del estudio del problema espectral del hamiltoniano para la ecuación unidimensional de Schrödinger, y del problema de la estabilidad de algunos sistemas dinámicos clásicos. En la sección 2 se presenta la formulación matricial de la ecuación de Schrödinger (se define la *matriz de transferencia*) y luego, la formulación matricial de las ecuaciones de movimiento de Hamilton para un problema del tipo del oscilador armónico (se define la *matriz de evolución*). En la sección 3 se expone los elementos básicos que permiten definir al *flujo fase* como el grupo de mapeos uniparamétricos que preservan el área; en particular, se obtiene la forma explícita de una típica matriz de evolución que luego se usará en el contexto de la mecánica cuántica. En la sección 4 se muestra la analogía formal entre el problema de confinamiento para las soluciones $\Psi(x)$ de la ecuación de Schrödinger que deben tener significado físico, y el problema clásico de estabilidad para los puntos $[q(t), p(t)]$ definidos en el espacio fase Φ . En las secciones 5, 6 y 7 se muestra explícitamente la aplicación del *criterio de la traza* que permite resolver el problema espectral cuántico (o bien el problema de estabilidad clásico) para algunos potenciales espaciales $V(x)$, entre los que resaltan el modelo periódico de Krönig-Penney y el modelo localizado de pozo cuadrado, que se encuentran tradicionalmente expuestos en forma exhaustiva en los textos conocidos. Así,

se puede comparar y apreciar las ventajas pedagógicas del método expuesto en este trabajo.

2. MATRICES DE TRANSFERENCIA Y EVOLUCIÓN

Consideremos a continuación la ecuación unidimensional de Schrödinger independiente del tiempo para un cierto potencial espacial arbitrario $V(x)$,

$$H\Psi(x) \equiv \frac{-(\hbar)^2}{2m}\partial_x^2\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (1)$$

donde H es el operador hamiltoniano independiente del tiempo. La ec. (1) se puede reescribir como

$$\partial_x^2\Psi(x) + g(x)\Psi(x) = 0, \quad (2)$$

donde se definió $g(x) \equiv (E - V(x))$ y se estableció un sistema de unidades naturales tales que $(\hbar)^2 = 2m = 1$. La ec. (2) se puede a su vez representar de forma matricial como

$$\partial_x \begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \partial_x \Psi(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -g(x) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \partial_x \Psi(x) \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\equiv \Lambda(x)X(x).$$

El vector $X(x)$ así definido en (3) contiene a la función de onda $\Psi(x)$ y a su derivada espacial $\partial_x \Psi(x)$. Por otra parte, se puede pensar en obtener $X(x)$ para un valor arbitrario de x a partir de un valor “inicial” x_0 a través de una *matriz de transferencia* $T(x, x_0)$ definida por

$$X(x) = T(x, x_0)X(x_0) \quad (4)$$

De la sustitución de (4) en (3) resulta la ecuación diferencial

$$\partial_x T(x, x_0) = \Lambda(x)T(x, x_0), \quad (5)$$

donde $T(x_0, x_0) = 1$ es la matriz identidad. La solución formal de (5) para la matriz de transferencia es

$$T(x, x_0) = \exp \int_{x_0}^x \Lambda(x) dx, \quad (6)$$

y permite conocer finalmente el valor de $X(x)$ en cualquier posición x , esto es, los valores de la función de onda $\Psi(x)$ y de su derivada $\partial_x \Psi(x)$. Para algunos casos sencillos del potencial $V(x)$, como por ejemplo un potencial constante por tramos, la matriz $\Lambda(x)$ definida en (3) se puede integrar (en un tramo para el que $V(x)$ sea constante) a fin de permitir calcular explícitamente el valor de $T(x, x_0)$ en (6); la forma que tiene dicha solución explícita se muestra abajo en (13). Sin embargo, más allá de las soluciones explícitas de (6), esta ecuación nos permitirá apreciar una analogía muy interesante en el contexto de un área diferente de la física.

Consideremos en seguida al siguiente problema de la mecánica clásica: sea el hamiltoniano

$$H(t) = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}k(t)q^2, \quad (7)$$

que, para $k(t) > 0$, representa a un oscilador armónico unidimensional dependiente del tiempo, mientras que para $k(t) < 0$, representa el movimiento bajo la acción de un potencial elástico repulsivo. Las ecuaciones de Hamilton correspondientes son

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -k(t)q, \quad (8)$$

las mismas que se pueden describir en forma matricial como

$$\partial_t \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -k(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} \equiv \Gamma(t)Z(t), \quad (9)$$

donde $p(t) = \partial_t q(t)$. Definiendo la *matriz de evolución* $U(t, t_0)$ que relaciona el punto representado por $Z(t)$ (en el llamado *espacio fase* Φ) con las condiciones iniciales $Z(t_0)$ a través de $Z(t) = U(t, t_0)Z(t_0)$, se tiene por (9) que

$$\partial_t U(t, t_0) = \Gamma(t)U(t, t_0), \quad (10)$$

donde $U(t_0, t_0) = 1$ es la matriz identidad. Vemos así, que los problemas dados por las ecuaciones diferenciales (5) y (10) son formalmente equivalentes¹, por lo que la solución para $U(t, t_0)$ en (10) es análoga a la solución de (5) dada por (6).

3. FLUJO FASE

Un problema central de la dinámica clásica [1] es la descripción general del movimiento a través de un sistema de n ecuaciones diferenciales de primer orden representadas por la ecuación matricial

$$\partial_t Y(t) = f(Y(t), t), \quad (11)$$

¹ Después de las identificaciones $x \leftrightarrow t$, $\Psi(x) \leftrightarrow q(t)$, $\partial_x \Psi(x) \leftrightarrow \partial_t q(t) = p(t)$.

donde $Y(t) \in \mathfrak{R}^n$ es un vector n -dimensional compuesto de elementos reales. La solución para $Y(t)$ en (11) se relaciona con la condición inicial $Y(t_0)$ a través del mapeo bi-paramétrico $g(t, t_0)$ definido por $g(t, t_0) : Y(t_0) \rightarrow Y(t)$. Así, por inducción, se obtiene la propiedad de composición para estos mapeos,

$$Y(t_m) = g(t_m, t_{m-1}) \dots g(t_2, t_1) g(t_1, t_0) Y(t_0). \quad (12)$$

Al restringir la función vectorial f en (11) a ser lineal e independiente del tiempo, el mapeo g depende entonces de un solo parámetro, $g(t, t_0) = g(\tau)$, con $\tau \equiv t - t_0$. Este mapeo, para el caso de $Y(t)$ bidimensional, es la matriz de evolución $U(\tau)$, más conocida como *matriz de Floquet* en la teoría de los sistemas dinámicos [1][2][3]. La familia $\{U(\tau)\}$ de estos mapeos forma un grupo abeliano, ya que $U(\tau)U(\sigma) = U(\sigma)U(\tau)$, con elemento neutro $U(0) = 1$ e inverso $U(-\tau)$. Bajo estas condiciones, la evolución dada por el mapeo g aplicado a una vecindad Δ del punto $Y(t_0)$ (en el espacio fase Φ), se realiza de tal forma que se preserva el área de la región Δ , esto es, $\text{área}[\Delta] = \text{área}[U(\tau)\Delta]$. Lo anterior es una de las maneras de expresar el conocido teorema de Liouville [4][5], esto es, el *flujo fase* (o grupo de mapeos uniparamétricos $U(\tau)$) preserva el área, lo que implica que $\det U(\tau) = 1$ (es decir, la matriz de evolución $U(\tau)$ es unimodular).

La propiedad de composición (12) es particularmente útil cuando se divide un intervalo temporal arbitrario $[T = t_m, t_0]$ en m subintervalos iguales de tamaño τ , esto es, $[t_m, t_0] = [t_m, t_{m-1}] \cup [t_{m-1}, t_{m-2}] \dots [t_2, t_1] \cup [t_1, t_0]$; si en cada subintervalo $[t_{j+1}, t_j]$ se fija el valor de $\Gamma(t) = \Gamma_j$ como una constante, entonces la solución de (10) es inmediata:

$$U(t_{j+1}, t_j) = \begin{pmatrix} \cos(k_j \tau) & \frac{1}{k_j} \text{sen}(k_j \tau) \\ -k_j \text{sen}(k_j \tau) & \cos(k_j \tau) \end{pmatrix} \quad (13)$$

Así, la matriz de evolución $U(T, t_0)$ se calcula en forma aproximada como la composición de las matrices (13):

$$U(T, t_0) = U(t_m, t_{m-1}) U(t_{m-1}, t_{m-2}) \dots U(t_2, t_1) U(t_1, t_0)$$

4. ANALOGÍA ENTRE EL PROBLEMA ESPECTRAL CUÁNTICO Y EL PROBLEMA DE ESTABILIDAD CLÁSICO

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger (1) que son físicamente relevantes, corresponden a las funciones de onda $\Psi(x)$ acotadas, de tal forma que se pueda calcular promedios finitos para las cantidades físicas observables, esto es, $\Psi(x)$ debe pertenecer al conjunto de funciones de cuadrado integrable, $\Psi(x) \in L^2$. Así, la *evolución* del vector $X(x)$ descrita por (4) en un cierto "espacio fase", debe producir un vector $X(x)$ acotado (o confinado), esto es, que su magnitud $X(x)$ sea menor que algún real M ,

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} |X(x)| \leq M \quad (14)$$

Así, el problema espectral asociado a la ecuación de Schrödinger (1) consiste de hallar los valores del parámetro E que satisfacen las condiciones anteriores de confinamiento.

Por otra parte, en el dominio de la mecánica clásica, la descripción evolutiva del vector $Z(t)$ en (9) da lugar al concepto de *estabilidad* [3]: sean dos soluciones independientes de (9), $Z(t)$ y $Z'(t)$, con condiciones iniciales $Z(0)$ y $Z'(0)$; la trayectoria evolutiva de $Z(t)$ se dice *estable*, si para todo $\varepsilon > 0$, existe un $\delta > 0$ de tal forma que si $|Z(0) - Z'(0)| < \delta$, entonces $|Z(t) - Z'(t)| < \varepsilon$ para todo $t \in \mathbb{R}$. Si, además, $\lim_{t \rightarrow \infty} |Z(t) - Z'(t)| = 0$, entonces la trayectoria de $Z(t)$ en el espacio fase Φ es *Lyapunov-estable* (o asintóticamente convergente).

Aunque los conceptos anteriores de confinamiento y estabilidad de definen formalmente en dos áreas diferentes de la física, ambos surgen sin embargo del mismo tipo de problema matemático: hallar los autovalores de un operador hamiltoniano dado por (1) o (7), que permiten obtener soluciones acotadas o estables respectivamente.

5. POTENCIALES PERIÓDICOS

Consideremos la ecuación de Schrödinger (1) para potenciales periódicos de la forma $V(x + L) = V(x)$. Se tiene entonces que $g(x + L) = g(x)$ y $\Lambda(x + L) = \Lambda(x)$ en (3), por lo que la integral en (6), para $x = nL$ (con n entero) y $x_0 = 0$, queda como

$$T(nL, 0) = \expn\left(\int_0^L \Lambda(x) dx\right) = T^n(L, 0), \quad (15)$$

siendo (15) un reflejo de la propiedad de composición (12). Supongamos que la matriz de transferencia $T(L, 0)$ para un período L se puede diagonalizar por medio de la matriz no-singular D , esto es, $D^{-1}T(L, 0)D$, de tal forma que $T^n(L, 0)$ se calcule como

$$T^n(L, 0) = [DT(L, 0)D^{-1}]^n = D \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 \\ 0 & \lambda_2^n \end{pmatrix} D^{-1}, \quad (16)$$

suposición que es válida para los potenciales periódicos $V(x)$ físicamente relevantes. Los autovalores de $T(L, 0)$, λ_1 y λ_2 , corresponden a las soluciones para λ del polinomio característico

$$\lambda^2 - \lambda \text{Tr}T(L, 0) + \det T(L, 0) = 0, \quad (17)$$

donde $\text{Tr}T(L, 0)$ y $\det T(L, 0)$ son la traza y determinante de $T(L, 0)$ respectivamente. De manera muy interesante, se puede acudir a continuación a la analogía formal entre el problema espectral cuántico y el problema de estabilidad clásico: dado que la matriz de transferencia $T(L, 0)$ es equivalente a la matriz de evolución $U(\tau)$, y dado que ésta representa al flujo fase clásico para el cual se preserva el área, entonces también se cumple que $\det T(L, 0) = 1$; por otra parte, los autovalores de la matriz de evolución $U(\tau)$ (que en general son números

complejos) para los sistemas hamiltonianos representados por (8) cumplen con $\lambda_1^* = \lambda_2$, donde λ_1^* es el complejo conjugado de λ_1 . Así, se encuentra que solamente cuando $|\text{Tr}T(L, 0)| < 2$, el resultado de $\lim_{n \rightarrow \infty} T^n(L, 0)$ en (16) produce valores acotados o confinados del vector $X(x \rightarrow \infty)$ en (3), pues $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$. De aquí entonces, se obtiene ² los correspondientes autovalores E en la ecuación de Schrödinger (1).

En el contexto del problema cuántico dependiente del tiempo [6], la matriz de evolución $U(T, 0)$ asociada a algún potencial periódico $V(t + T) = V(t)$ tiene autovalores que también obedecen (17), lo que tiene efectos por demás interesantes: al sustituir el valor de λ por $U(T, 0)$ en (17) -de acuerdo al teorema de Hamilton-Cayley-, se obtiene *lazos evolutivos* [7] que, para los casos más sencillos, se representan por:

$$\begin{aligned} U^3(T, 0) &= 1 & \text{si } \text{Tr}U(T, 0) &= -1, \\ U^4(T, 0) &= 1 & \text{si } \text{Tr}U(T, 0) &= 0, \\ U^6(T, 0) &= 1 & \text{si } \text{Tr}U(T, 0) &= 1. \end{aligned} \quad (18)$$

Lo anterior significa el regreso a las condiciones iniciales de posición $q(t)$ y momento $p(t)$ al cabo de 3, 4 y 6 aplicaciones consecutivas del potencial periódico $V(t + T) = V(t)$, correspondientemente. La predicción teórica para dichos lazos evolutivos es válida independientemente de la estructura analítica de $U(T, 0)$, lo que resulta interesante pues -en general- el cálculo explícito de $U(T, 0)$ es un problema no-trivial. Sin embargo, existen también los casos más sencillos de los potenciales constantes por tramos, para los que se verifica fácilmente (18). Asimismo, en el caso del problema espectral cuántico para los potenciales espaciales periódicos $V(x + L) = V(x)$ que son constantes por tramos, se obtiene expresiones analíticas compactas que conducen a la solución del problema. Veamos a continuación algunos de estos casos.

5.1. Series de pozos y barreras

Este modelo de potencial (conocido como *modelo de Krö nig-Penney* [8]) está descrito por

$$V(x) = \begin{cases} a, & 0 \leq x < l_1 \\ -a, & l_1 \leq x < l_1 + l_2 = L \end{cases} \quad (19)$$

donde a es una constante real positiva. En este caso, la traza de la matriz de transferencia es

$$\begin{aligned} S(E, a) = \text{Tr}T(L, 0) &= 2\cos(\ell_2\sqrt{E+a})\cos(\ell_1\sqrt{E-a}) \\ &- \frac{2E}{\sqrt{E^2-a^2}}\text{sen}(\ell_2\sqrt{E+a})\text{sen}(\ell_1\sqrt{E-a}). \end{aligned} \quad (20)$$

La función "traza" $S(E, a)$ dada en (20) se puede graficar (para $l_1 = l_2 = 1$) en los ejes E vs. a (ver Fig.1(a)) de tal forma que los valores $S(E, a) = \pm 2$ definen las fronteras entre las regiones $|S(E, a)| > 2$ (zonas

²El criterio de confinamiento $|\text{Tr}T(L, 0)| < 2$ no es nuevo; de hecho, se ha utilizado tradicionalmente en varios tipos de aplicaciones, por ejemplo, en problemas espectrales para potenciales periódicos [9].

blancas y negras) y $|S(E, a)| < 2$ (zonas grises); estas últimas regiones comprenden el conjunto de valores de E y a para los que se cumple la condición de confinamiento o “estabilidad” (14). Al fijar un valor de a en el anterior diagrama, los valores de E pertenecientes a las regiones de estabilidad definen el espectro del hamiltoniano H asociado a la ecuación de Schrödinger (1), dando así lugar a la típica *estructura de bandas* de dicho hamiltoniano [10][11][12]. Los valores de E comprendidos por las zonas claras y oscuras determinan el *conjunto resolvente* del hamiltoniano ³. De manera muy interesante, la Fig.1 refleja un comportamiento específico en el dominio de la mecánica clásica, particularmente en lo que respecta a los llamados *sistemas excitados parametricamente* [1][4][13][14][15]. Tal es el caso, por ejemplo, de un péndulo invertido (con varilla rígida de longitud l) cuyo punto de suspensión oscila armónicamente (bajo la acción de la aceleración de la gravedad g) con amplitud A y frecuencia angular w . Eligiendo la coordenada generalizada $q(t) = \theta(t)$ como el ángulo que forma el péndulo invertido con respecto a la vertical, entonces la ec. de movimiento (8) toma la forma de la conocida ec. de Mathieu [2][14] $\partial_t^2 \theta + k(t)\theta = 0$, con $k(t) = \delta + \varepsilon \cos wt$, donde $\delta \equiv -gl^{-1}$ y $\varepsilon \equiv Aw^2l^{-1}$. Para este sistema clásico ⁴, se encuentra que existen condiciones de equilibrio estable cuando el péndulo está invertido ($\theta \sim 0^\circ$) dependiendo de los valores de los parámetros δ y ε , que se grafican en un diagrama de estabilidad conocido como *diagrama de Strutt* [14][15]. Este diagrama resulta análogo ⁵ a la Fig.1, después de identificar $\delta \leftrightarrow a$ y $\varepsilon \leftrightarrow E$. Así, las zonas grises contendrían a los valores de δ y ε asociados a un régimen oscilatorio estable del péndulo invertido.

5.2. Serie uniforme de pulsos delta

Este modelo de potencial está descrito por

$$V(x) = k \sum_n \delta(x - nL), \quad (21)$$

donde k es una constante real y $\delta(x)$ es la delta de Dirac. Este potencial corresponde al caso límite de (19) cuando $V(x)$ se sustituye por $V(x) + a$, donde $\lim_{a \rightarrow \infty, \ell_1 \rightarrow 0} k$ y $L = \ell_1 + \ell_2 = 2$ se mantiene constante. La correspondiente traza de la matriz de transferencia es

$$S(E, k) = 2\cos(L\sqrt{E}) + \frac{k}{\sqrt{E}}\text{sen}(L\sqrt{E}). \quad (22)$$

El diagrama de estabilidad (Fig.1(b)) corresponde al sitio geométrico definido por los valores de $|S(E, k)| < 2$

³En la ref. [16] se resuelve el mismo problema espectral para el modelo de Krönig-Penney utilizando el criterio conocido $|TrT(L, 0)| < 2$, aunque en forma ajena al contexto de la ecuación unidimensional de Schrödinger como un problema dinámico clásico [17][18]. Debe señalarse que, contrariamente a la afirmación de los autores de [16], de ninguna manera ellos han desarrollado un método novedoso, aún cuando se presente como un algoritmo computacional muy eficiente y práctico.

⁴Conocido también como *péndulo de Kapitza* (ver, por ejemplo, <http://www.fam.dt.u.dk/html/FVP/dima/Fast.html>).

⁵Si en lugar de $V(x)$ en (19) se utiliza $V(x) = a\cos\pi x$, el diagrama de *estabilidad* determinado por $S(E, a) = \pm 2$ coincide con el diagrama de Strutt.

(zonas grises). Para un valor fijo del parámetro k , los intervalos de estabilidad indican el espectro del hamiltoniano de (1) que muestra la típica estructura de bandas, mientras que las zonas blancas y negras comprenden al conjunto resolvente del hamiltoniano. Esta estructura de bandas corresponde al caso más sencillo del modelo de Krönig-Penney, que fue el que se reportó en la literatura por primera vez [8].

5.3. Serie alternada de pulsos delta

Este modelo de potencial resulta de una modificación de (21) y está descrito por

$$V(x) = k \sum_n (-1)^n \delta(x - nL), \quad (23)$$

A este tipo de potencial le corresponde una matriz de transferencia $T(L, 0)$ cuya traza es

$$S(E, k) = 2\cos^2(L\sqrt{E}) + (2 + k^2/E)\text{sen}^2(L\sqrt{E}). \quad (24)$$

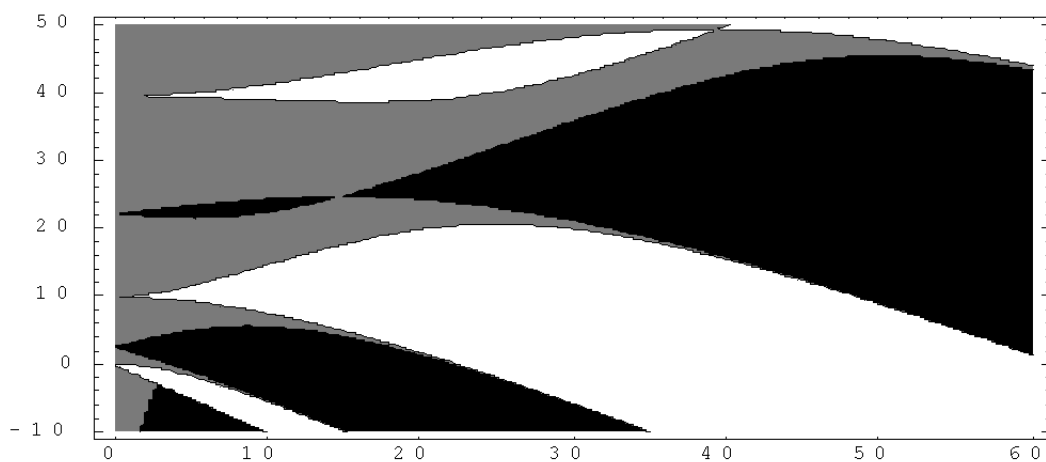
El diagrama correspondiente de estabilidad se muestra en la Fig.1(c).

6. POTENCIALES LOCALIZADOS

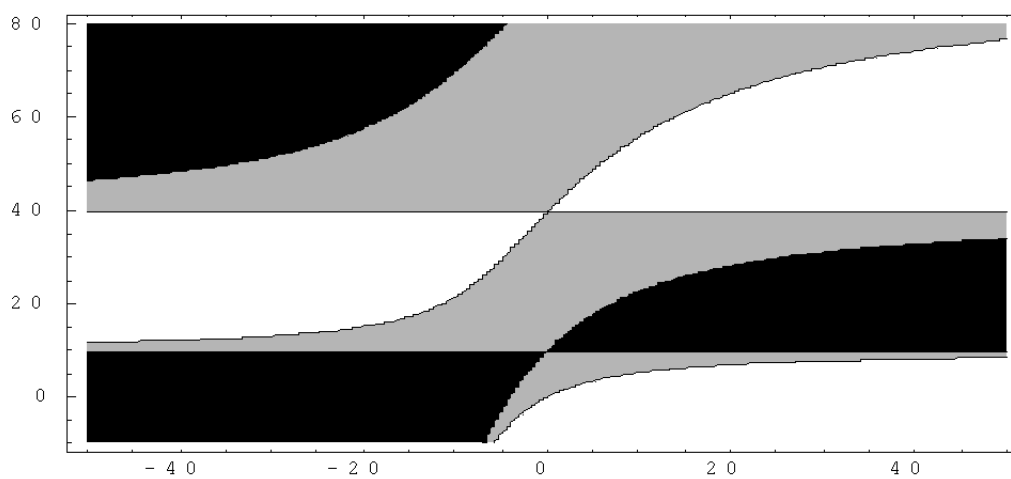
Consideremos a continuación los potenciales localizados $V(x)$, es decir, aquellos potenciales para los que $V(x) = 0$ cuando $x \notin [-M, M]$, con $M \in \mathfrak{R}$. Aunque el *alcance* M de $V(x)$ es simétrico alrededor de $x = 0$, la forma específica de $V(x)$ en el intervalo $x \in [-M, M]$, es arbitraria. Las soluciones físicamente relevantes de la ecuación de Schrödinger (1) para estos potenciales son aquellas para las que $\lim_{x \rightarrow \infty} X(x) = 0$, lo que es cierto para las funciones de cuadrado integrable $\Psi \in L^2$ [6][19]. Así, los valores exactos de E en (1) que permiten la convergencia asintótica de $X(x)$ expresada por el anterior límite, conforman el *espectro discreto o puntual* asociado al hamiltoniano H en (1). La imagen clásica equivalente al problema cuántico corresponde a un hamiltoniano clásico $H(t)$ dado por (7), donde se puede especificar $k(t) = \varepsilon - v(t)$: $\varepsilon < 0$ representa la acción repulsiva de un cierto potencial dispersivo, mientras que $v(t) < 0$ representa la acción de fuerzas elásticas atractivas. Así, por ejemplo, se puede pensar en el siguiente problema de estabilidad clásico: una partícula puntual se halla sobre la superficie de una esfera sin fricción, por lo que el potencial es repulsivo o dispersivo ($\varepsilon < 0$); luego, se trata de elegir los valores de un potencial atractivo ($v(t) < 0$) así como los instantes en que debe actuar sobre la partícula -a manera de patadas o jalones atractivos- para que la evolución en el espacio fase Φ del vector $Z(t)$ dado por (9) sea asintóticamente convergente, lo que significa que la partícula, al cabo de un tiempo muy largo, retornará eventualmente al origen (el punto superior de la superficie esférica) y allí se quedará en reposo.

La solución formal de (6) en las regiones $x \notin [-M, M]$, en donde $V(x) = 0$ está dada por las matrices de transferencia

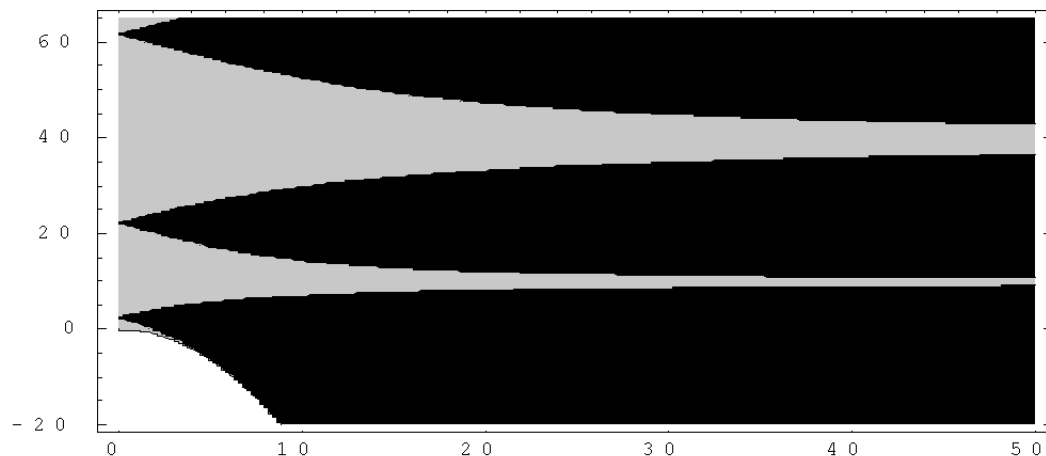
$$\begin{aligned} T(x, -M) &= e^{(x+M)\Lambda}, & x < -M, \\ T(x, M) &= e^{(x-M)\Lambda}, & x > M. \end{aligned} \quad (25)$$



(a)



(b)



(c)

Figura 1. Diagramas de *estabilidad* para la función de traza $S(E, a)$; el eje vertical es E y el eje horizontal es a en los tres casos. Las zonas grises indican los valores de $|S(E, a)| < 2$, mientras que las zonas blancas y negras indican los valores de $|S(E, a)| > 2$. El gráfico (a) corresponde al potencial constante por tramos (19) con función de traza (20); el gráfico (b) corresponde a la serie uniforme de pulsos delta (21) con función de traza (22), y el gráfico (c) corresponde a la serie alternada de pulsos delta (23) con función de traza (24). Los gráficos (a) y (c) son simétricos con respecto a la transformación $a \rightarrow -a$.

La matriz Λ tiene autovectores normalizados (o *kets*)

$$|E, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm\sqrt{|E|} \end{pmatrix} \quad (26)$$

con autovalores correspondientes $\lambda = \pm\sqrt{|E|}$, lo que implica para $E < 0$:

$$e^{\tau\Lambda}|E, \pm\rangle = e^{\pm\tau\sqrt{|E|}}|E, \pm\rangle \quad (27)$$

para un cierto intervalo espacial de longitud τ . A continuación, se puede introducir los vectores duales (o *bras*) dados por

$$\langle \pm, E| = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \pm 1/\sqrt{|E|}), \quad (28)$$

de tal forma que se verifique las condiciones de ortonormalidad

$$\begin{aligned} \langle \pm, E|E, \pm\rangle &= 1, \\ \langle \pm, E|E, \mp\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (29)$$

Observando (27) podemos confirmar que la convergencia asintótica que se busca para los vectores $X(x)$ ocurre solamente para las condiciones de borde

$$\begin{aligned} X(-M) &= |E, +\rangle, \\ X(M) &= \alpha|E, -\rangle. \end{aligned} \quad (30)$$

para un cierto α real. Luego, la evolución de $X(x)$ en el intervalo $x \in [-M, M]$ tiene que obedecer

$$T(M, -M)|E, +\rangle = \alpha|E, -\rangle, \quad (31)$$

de donde se construye una función $D(E, M)$ dada por

$$D(E, M) = \langle +, E|T(M, -M)|E, -\rangle. \quad (32)$$

Así, la condición $D(E, M) = 0$ es equivalente a (31) y se puede utilizar para encontrar los valores E que, para potenciales localizados, constituyen un conjunto discreto llamado *espectro puntual*⁶ del hamiltoniano H en (1). Veamos a continuación algunas aplicaciones sencillas de la condición $D(E, M) = 0$ para algunos potenciales localizados como ser tres pulsos delta y luego un pozo cuadrado.

6.1. Pulsos delta

Consideremos el potencial compuesto por una sucesión de tres pulsos delta,

$$V(x) = -k \sum_{n=1}^3 \delta(x - x_n), \quad (33)$$

con $x_1, x_2, x_3 \in [-M, M]$. De la condición $D(E, M) = 0$ se tiene que

$$e^{2\mu\eta} = \frac{k^2[1 + e^{-2\xi\mu}(2\mu + k)(2\mu - k)^{-1}]}{(2\mu - k)^2 - k^2e^{-2\xi\mu}}, \quad (34)$$

⁶De aquí, la función $D(E, M)$ puede ser referida como *discriminante discreto* [17].

donde $\mu \equiv \sqrt{|E|} \neq 0$, $\xi \equiv x_2 - x_1$, $\eta \equiv x_3 - x_2$. La fórmula (34) permite obtener los casos correspondientes para dos pulsos y un solo pulso delta a través de los límites $\eta \rightarrow \infty$ y $\eta, \xi \rightarrow \infty$ respectivamente. Así se obtiene -para cada caso- las expresiones $\exp(\xi\mu) = k/(k - 2\mu)$ y $\mu = k/2$. Por ejemplo, para el caso anterior de dos pulsos delta se tiene las expresiones

$$\tanh M\mu = \begin{cases} k/\mu - 1 \\ \mu/(k - \mu) \end{cases} \quad (35)$$

a través de las cuales se determina las energías correspondientes a las soluciones par e impar del problema conocido de la molécula diatómica (ver, por ejemplo, la ref. [12]).

6.2. Pozo cuadrado

Consideremos el potencial de un pozo cuadrado dado por

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x \in [-M, M] \\ 0, & x \notin [-M, M] \end{cases} \quad (36)$$

con $V_0 > 0$. La condición $D(E, M) = 0$ conduce a la expresión

$$v^2 = \frac{1}{2}V_0[1 \pm \cos(2Mv)], \quad (37)$$

donde $v \equiv \sqrt{V_0 - |E|}$ y $|E| < V_0$. Las soluciones de (37) para E se obtienen a partir de rutinas numéricas sencillas. Cuando $|E| > V_0$, (37) no tiene soluciones reales para E , i.e., no existe un espectro puntual (es sabido que para este caso el espectro es continuo [6] [12][19]). Los signos \pm en (37) corresponden a las soluciones par e impar respectivamente de la ecuación de Schrödinger (ver, por ejemplo, la ref. [19]). Entre los aspectos conocidos del espectro del pozo cuadrado se verifica que, en el límite $V_0 \rightarrow \infty$ (pozo infinito), los valores de v en (37) se agrupan alrededor de $n\pi/(2M)$, lo que conduce -a través de un reescalamiento apropiado- al espectro conocido del pozo infinito [6][12][19]. En efecto, sustituyendo $V(x) \rightarrow V'(x) - V_0$ y $|E| \rightarrow V_0 - E'$ se obtiene el espectro puntual $E' = [n\pi/(2M)]^2$. Otro límite interesante de verificar corresponde $M \rightarrow 0$ (con V_0 constante), para el que el espectro correspondiente tiende a formar *un continuo* de valores de E , es decir, que la separación entre valores adyacentes de E tiende a ser nula.

7. CONCLUSIONES

Se expuso una forma de plantear el problema espectral de la ecuación unidimensional de Schrödinger (1) independiente del tiempo, con relación a su análogo en la mecánica clásica: el problema de estabilidad en sistemas dinámicos con un hamiltoniano (7) dependiente del tiempo. Dicha analogía es posible en vista de que ambos problemas se describen matemáticamente de la misma forma a través del mismo tipo de ecuación diferencial representada por (3) o (9) respectivamente. Para los potenciales espaciales $V(x)$ periódicos o localizados, las soluciones de la ecuación de Schrödinger (1) que son

físicamente relevantes (funciones de ondas de cuadrado integrable) se obtienen al obedecer un criterio matemático simple: la función de traza $S(E, a)$ de la matriz de transferencia debe cumplir la relación $|S(E, a)| < 2$. Esta función $S(E, a)$ se puede obtener de manera sencilla para algunos potenciales como ser los potenciales periódicos constantes por tramos y potenciales localizados como el pozo cuadrado o las secuencias de deltas. De esta forma, se puede encontrar numéricamente (y en algunos casos analíticamente) los valores del parámetro E que determinan el espectro del hamiltoniano H en (1). Los resultados que se obtiene por este método coinciden con aquellos que usualmente se expone en los libros de texto, como ser la estructura de bandas correspondiente al modelo de potencial periódico de Krönig-Penney o el espectro discreto del pozo cuadrado. Las técnicas expuestas en este trabajo permiten una ventaja pedagógica con respecto a los métodos tradicionales, pues se logra resolver el problema espectral cuántico para una cierta variedad de potenciales $V(x)$ de una forma más compacta y directa. Ciertamente, la generalización de dichas técnicas a cualquier tipo de potencial (periódico o localizado) necesariamente se hará a través de la aproximación de dividir el potencial $V(x)$ en regiones donde éste sea constante por tramos (i.e., a través de *segmentar* el potencial).

REFERENCIAS

- [1] Bartlett J.; Classical and Modern Mechanics: Non-autonomous systems (U. of Alabama Press, 1975).
- [2] Magnus W., Winkler S; Hill's equation; Interscience Tracts in Pure and Applied Mathematics vol. 20 (Wiley, 1966).
- [3] Krasnov M.L.; Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (MIR, 1987).
- [4] Arnold V.I.; Mathematical Methods of Classical Mechanics, (Springer-Verlag, 1978).
- [5] Goldstein H.; Mecánica Clásica (Reverté, 1988).
- [6] Cohen-Tannoudji C.; Quantum Mechanics (Wiley, 1977).
- [7] Mielnik B.; Evolution Loops; J. of Math. Phys. 27, 9, 2290 (1986).
- [8] Krönig R., Penney W.; Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices; Proc. of the Royal Society A130, 499 (1931).
- [9] Luttinger J.M.; Wave Propagation in One-Dimensional Structures; Philips Res. Rep. 6, 303 (1951).
- [10] Madelung O.; Introduction to Solid State Theory (Springer-Verlag, 1996).
- [11] McKelvey J.; Física del Estado Sólido y Semiconductores (Harper & Row, 1966).
- [12] Gasiorowicz S.; Quantum Physics (Wiley, 1974).
- [13] Landau L., Lifshitz L.; Quantum Mechanics (Course of Theoretical Physics, vol. 3, Pergamon Press, 1977).
- [14] Bender C., Orszag S.; Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers; International Series in Pure and Applied Mathematics (McGraw-Hill, 1978).
- [15] Nayfeh A.H., Mook D.T.; Non-Linear Oscillations; Pu-

- re & Applied Mathematics (Interscience Series, Wiley, 1979).
- [16] Lee A.R., Kalotas T.M.; Solution to the One-Dimensional Schrödinger Equation in an Arbitrary Periodic Potential; Physica Scripta 44, 313 (1991).
- [17] Sanjinés D.; One-Dimensional Schrödinger Equation as a Classical Dynamical Problem; Rev. Mex. de Física 36 (S1), 181 (1990).
- [18] Mielnik B., Reyes M.; The Classical Schrödinger Equation; J. Phys. A: Math. Gen. 29, 6009 (1996).
- [19] Merzbacher E.; Quantum Mechanics (Wiley, 1981).

⁷Estas aplicaciones están restringidas, sin embargo, a los potenciales periódicos y constantes por tramos o localizados del tipo secuencia de deltas o del tipo pozo cuadrado. No obstante, la formulación general de la teoría es válida para potenciales periódicos o localizados arbitrarios.