



CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DE ESTUDIOS AVANZADOS
DEL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
DEPARTAMENTO DE COMPUTACIÓN

Simulación de paquetes de onda y teoría de Weyl

Tesis que presenta

Amilcar Meneses Viveros

Para obtener el grado de

Doctor en Ciencias

En la especialidad de

**Ingeniería Eléctrica
Opción Computación**

Director de la Tesis: **Dr. Sergio V. Chapa Vergara**

México, D. F.

Febrero 2009

Agradecimientos

Este trabajo es producto del esfuerzo de muchas instituciones y personas que de una forma u otra me han apoyado en todo el proceso de formación profesional.

Quisiera iniciar agradeciendo al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo económico que me brindó durante mis estudios de doctorado.

Debo reconocer y agradecer a todos los profesores e investigadores que han tenido la paciencia de enseñarme que no hay cosas que no se puedan aprender. En especial a los investigadores del ahora Departamento de Computación del CINVESTAV y del Departamento de Aplicación de Microcomputadoras del Instituto de Ciencias de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

A mis asesores Dr. Sergio V. Chapa Vergara y Dr. Harold V. McIntosh les estoy agradecido por varias razones: porque me han dado la oportunidad de trabajar en un área interesante que me era desconocida y que me ha permitido tener una visión más general sobre la computación científica; y porque me han enseñado a mantener un carácter humano dentro de esta locura llamada "puntitis".

Al Dublin Institute for Advanced Studies (DIAS) y al profesor Denjoe O'Connor por darme la oportunidad de hacer la estancia doctoral en la School of Theoretical Physics de DIAS. La enseñanza de vida adquirida durante mi estancia en STP-DIAS ha sido un aporte invaluable en mi formación personal y profesional. Siempre les estaré muy agradecido.

A Hugo García Monroy, amigo y mentor, por haberme animado e impulsado a realizar los estudios de postgrado en CINVESTAV.

A los sinodales de este trabajo Dr. Rafael Baquero, Dr. Dr. José Antonio Moreno, Dr. Jose Juan Peña y Dr. José Matías Alvarado, por sus acertados comentarios y agradables discusiones que me permitieron darle el rumbo adecuado al desarrollo del trabajo de tesis y al proceso de escritura.

A todas esas personas en las que uno sabe que puede confiar y que te tenderán la mano en las situaciones más difíciles: los amigos. Sin orden de preferencia, me gustaría agradecerles todo su apoyo a Ma. Mercedes Zanotto Gonzalez, Ma. Francisca Valera López, Juan Manuel Sánchez Aguirre, Lorena Chavarría Báez, Nidia Asunción Cortez Duarte y Susana Georgina Zarate Ochoa.

A Sofia Reza y Flor Cordova, secretarias del Departamento de Computación, por toda la ayuda que me brindaron para poder librar los obstáculos burocráticos que hay en CINVESTAV.

A mi madre por todo el esfuerzo que realiza cada día para que mis hermanos y yo seamos mejores personas. A mis hermanos a quienes no cambiaría por nada de este mundo.

A mi hija Isabela, quien día a día me muestra que debemos crecer y esforzarnos para alcanzar nuestras metas. Finalmente a Julieta, mi amiga y compañera de vida, por ayudarme a crecer como persona y por brindarme su amor y apoyo.

Contenido

Índice de Figuras	ix
Resumen	1
Abstract	2
1 Introducción	3
2 Paquetes de onda	11
2.1 Introducción	12
2.2 Análisis de Fourier de las funciones de onda	12
2.2.1 Funciones cuadráticamente integrables	13
2.2.2 Convergencia de las series de Fourier	14
2.3 El espacio de Hilbert de las funciones cuadráticamente integrables	14
2.3.1 Espacio lineal	14
2.3.2 Norma y producto escalar	14
2.3.3 Ortogonalidad	15
2.4 Las ecuaciones de Schrödinger y Dirac	16
2.4.1 La ecuación de Schrödinger	17
2.4.2 La ecuación de Dirac	18
2.4.3 Relación de incertidumbre de Heisenberg	20
2.4.4 El espacio de Hilbert de las funciones de onda	20
2.4.5 La representación estándar	22
2.4.6 Observables	23
2.4.7 Regla de interpretación	24
2.5 Ondas planas y paquetes de onda	25
2.5.1 Ondas planas	25
2.5.2 El paquete de ondas gaussiano	26
2.5.3 Paquetes de onda en mecánica cuántica	27
2.5.4 El espectro	29
2.6 Simulación	30
2.6.1 Paquetes de ondas no relativistas	30
2.6.2 Simulación de paquetes de onda relativistas	31

2.6.3	El espectro	31
2.6.4	El enfoque de integral de Stieltjes	36
2.7	Conclusiones	36
3	Transformación de Möbius e integral de Stieltjes	39
3.1	Transformación de Möbius	39
3.1.1	Descomposición de la transformación de Möbius	42
3.2	El círculo inversor	44
3.3	Puntos de interés	44
3.4	Mapeo de semiplanos	45
3.4.1	Puntos fijos y círculos invariantes	51
3.4.2	Un ejemplo	54
3.4.3	Familia de círculos invariantes	54
3.5	Integral de Stieltjes	54
3.5.1	Condiciones de existencia	55
3.5.2	Clases de pares de funciones integrables	56
3.5.3	Propiedades de las integrales de Stieltjes	57
3.5.4	Computación de la integral de Stieltjes	58
3.5.5	El teorema del valor medio y estimados	59
3.6	Conclusiones	60
4	Estudio geométrico de la función m de Weyl-Titchmarsh	61
4.1	Teoría de Sturm-Liouville	61
4.1.1	Teoría de Sturm sobre la distribución de ceros de la solución	63
4.2	El problema singular de Sturm-Liouville	64
4.3	Casos círculo límite y punto límite	65
4.4	La función m y el mapeo de semiplanos	67
4.5	Una familia de soluciones $\psi(x, \lambda)$	70
4.5.1	Dominio de x	70
4.5.2	Familia de soluciones para el dominio de valores propios	72
4.6	El espectro del operador diferencial de Sturm-Liouville a partir de la función m de Weyl-Titchmarsh	73
4.7	La función de densidad espectral ρ	74
4.8	Conclusiones	76
5	Casos de estudio	79
5.1	Partícula libre de Schrödinger	79
5.2	Partícula libre de Dirac	84
5.3	Pozo infinito	88
5.3.1	La función espectral ρ	92
5.4	Conclusiones	94

6	Discusión, resultados y conclusiones	97
6.1	Discusión	97
6.2	Aportaciones	98
6.3	Conclusiones	99
6.4	Trabajo a futuro	99
A	Visualización de funciones y transformaciones complejas	101
A.1	La translación $z + A$	104
A.2	La multiplicación Az	105
A.3	La transformación $1/z$	107
	Bibliografía	110

Lista de Figuras

1.1	Pasos en un proceso de computación Científica	3
2.1	Coeficientes de Fourier para la partícula libre no relativista.	32
2.2	Coeficientes a_k para la partícula libre relativista	33
2.3	Comportamiento de la parte temporal en un paquete de ondas.	34
2.4	Aparición de ciclos para distintas longitudes de espectro y número de particiones	35
3.1	Gráficas de contorno y fase para $\mathcal{M}(z) = \frac{-z+1}{(1+0.5i)^{z+1}}$	45
3.2	Círculo que produce el mapeo del eje real bajo una transformación de Möbius	47
3.3	Círculo invariante para $m(z) = \frac{-z+1}{(1+0.5i)^{z+1}}$	52
3.4	Familia de círculos invariantes	55
4.1	Función $\cot \beta$	66
4.2	Recorrido en el intervalo \mathbb{I}_z	73
4.3	Aproximación del polo de la función m de Weyl-Titchmarsh	75
4.4	Función de densidad espectral ρ	76
5.1	Evolución del paquete de onda de la partícula libre de Schrödinger con superposición de soluciones estacionarias	80
5.2	Aproximaciones de la función m de Weyl para $b = 50$ y $b = 130$	82
5.3	Función m propuesta por Titchmarsh para el caso de la partícula libre no relativista	83
5.4	Función ρ y ρ'	84
5.5	Comparación de las funciones ρ obtenidas a partir de la función m propuesta por Titchmarsh y la calculada numéricamente.	85
5.6	Evolución del paquete de ondas de la partícula libre como integral de Stieltjes.	85
5.7	Coeficientes a_k para la partícula libre relativista	87
5.8	Partícula libre de Dirac con un estado inicial con σ pequeño.	88
5.9	Partícula libre de Dirac con un estado inicial con $\sigma > k_0$	89
5.10	Potencial del pozo infinito	89
5.11	Soluciones del pozo cuadrado para $a = 1$	91

5.12	Valores de los coeficientes a_n , para el caso en que $a = 1$, y los valores del estado inicial $\psi(x, 0)$ son $k_0 = 0.2$, $\sigma = 0.25$ y $x_0 = 0$	91
5.13	Función m para el caso del pozo infinito.	92
5.14	Función de densidad espectral ρ para el pozo infinito de potencial.	93
5.15	Evolución del paquete de ondas del pozo infinito no relativista para lapsos de tiempo $[0, 0.67]$ y $[0, 0.5]$	93
5.16	Evolución del paquete de ondas del pozo infinito no relativista cuando $x_0 = 0.2$	94
5.17	Función m para el caso del pozo infinito no relativista	94
5.18	Aproximación de la función de densidad espectral ρ de la partícula libre mediante funciones de densidad espectrales conforme $b \rightarrow \infty$	95
A.1	Mapeo conforme de la función $\frac{1}{z}$	101
A.2	Curvas de nivel y mapeo conforme de la función compleja \sinh	102
A.3	Espacio de fase de la identidad y z^2	103
A.4	Ejemplos de translación en el plano complejo	104
A.5	Contornos y fase de una translación	105
A.6	La multiplicación compleja es una rotación y un escalamiento	105
A.7	Contornos y fase de la multiplicación Az	106
A.8	Gráfica de r^{-1}	107
A.9	Mapeo real y mapeo imaginario de $1/z$	108
A.10	Contorno y fase de $1/z$	109

Lista de Algoritmos

1 Espectro a partir de la función m de Weyl-Titchmarsh 74

Resumen

Uno de los problemas fundamentales en mecánica cuántica es encontrar soluciones a las ecuaciones de Schrödinger y Dirac que sean cuadráticamente integrables. Una forma de encontrar estas soluciones es usando la simulación por computadora. Para ello se requiere de tener un modelo matemático-computacional que nos ayude a tener los algoritmos sobre los cuales se ejecutará la simulación. Por consecuencia, el objetivo principal de esta tesis es encontrar este tipo de soluciones. Los paquetes de ondas se utilizan para formar soluciones cuadráticamente integrables. El paquete de ondas es una superposición de soluciones a las ecuaciones de onda, que corresponden al espectro del sistema. Además, los paquetes de onda permiten estudiar el comportamiento de los sistemas cuánticos. Debido a que un paquete de onda se plantea como la superposición de estados base, la solución obvia es usar sumas y/o integrales de Riemann, dependiendo del espectro del sistema. Sin embargo, la tarea de encontrar, identificar y manejar el espectro es difícil. Una solución a este problema es trabajar el espectro mediante la función de densidad espectral ρ y construir el paquete de ondas como una integral de Stieltjes, donde ρ es la función integradora. Esto tiene la ventaja de que no se calcula el espectro ni tiene importancia si el sistema tiene espectro discreto o continuo.

En este trabajo de tesis desarrollamos un método matemático para obtener a la función de densidad espectral ρ . Para ello, aprovechamos la relación que existe entre la función ρ y la función m de Weyl-Titchmarsh, que aparece en el problema singular de Sturm-Liouville, para calcular a la función de densidad espectral y construir los paquetes de onda como integrales de Stieltjes. Debido a que encontrar a la función m no es una tarea sencilla y como la función m tiene la forma de una transformación de Möbius; podemos aprovechar las propiedades geométricas en el plano complejo que esta transformación tiene para obtener las propiedades al infinito y en el eje real de la función m en el dominio de valores propios. De esta forma podemos deducir el comportamiento de las soluciones del problema singular de Sturm-Liouville que permitan construir la función m de Weyl-Titchmarsh. Este enfoque tiene la ventaja de poder describir con mayor precisión las características asintóticas de las soluciones que forman a la función m , y además de que incorporamos el soporte matemático que hay en la teoría de Weyl para ayudar a explicar el comportamiento de los paquetes de onda. Probamos el método propuesto realizando simulaciones en sistemas cuánticos sencillos que tienen espectros discretos y espectros continuos y los resultados que se obtienen son similares a los que se manejan en la literatura.

Abstract

Obtaining square integrable solutions to Schrodinger and Dirac equations is a fundamental problem in quantum mechanics. One way to obtain this solutions is using computer simulation. To do this, you must have a mathematical computational model that helps us to describe the algorithms on which the simulation is run. Accordingly, the main objective of this thesis is to find such solutions. The wave packets are used to build square integrable solutions. A wave packet is a superposition of the solutions to the wave equations corresponding to the spectrum of the system. Moreover, the wave packet allows to study the behavior of quantum systems. Since a wave packet is the superposition of states, the obvious solution is to use Riemann sums and/or Riemann integrals depending on the spectrum of the system. However, the task to obtain, identify and manage the spectrum is difficult. One solution to this problem is to manage the spectrum using the spectral density function ρ and build the wave packet as a Stieltjes integral. It is important neither to compute the spectrum nor to know its type to build wave packet.

In this thesis we developed a mathematical method to obtain the spectral density function ρ . To do this we use the relationship between ρ and the Weyl-Titchmarsh m -function to compute the spectral density function. With this function we can build the wave packets. The m -function appear in the Weyl theory or singular Sturm-Liouville problem. Since the m function is difficult to calculate and the m function and how this function is a Möbius transformation, we can use the geometric properties of the Möbius transformation on the complex plane to obtain the properties at infinity and in the real axis of the Weyl-Titchmarsh m -function. This approach has the advantage of being able to describe more accurately the asymptotic characteristics of solutions that are in a m -function, and that incorporates the mathematical support of the Wely theory to help to explain the behavior of the packets wave. We tested the proposed method by simulations in simple quantum systems and the results were similar to those in the literature.

Capítulo 1

Introducción

Simulación es el uso de un modelo para desarrollar conclusiones que proporcionen una visión sobre el comportamiento de cualquier elemento del mundo real. La simulación por computadora usa el mismo concepto pero requiere que el modelo sea desarrollado mediante un programa en una computadora. En la actualidad, la simulación por computadora se presenta como una herramienta importante para estudiar y entender fenómenos naturales. Al campo de estudio que se dedica a aplicar la simulación por computadora a problemas de disciplinas científicas y de ingeniería se le conoce como *Computación Científica*.

La computación científica está estrechamente ligada a la experimentación numérica, visualización y resolución de problemas de carácter científico dentro del contexto de la experimentación computacional. Esto es, aprovechar el conjunto de técnicas, métodos y paradigmas de computación para representar y resolver problemas científicos. Muchos problemas en computación científica requieren de gran poder de computación para resolver un problema. El uso de supercomputadoras o clusters es común en esta área de computación, aunque no es una condición general.

En la figura (1.1) se presenta, de manera resumida, los pasos que se usan en la computación científica. El éxito de un proyecto de simulación por computadora depende mucho del cuidado en que se realicen cada uno de estos pasos. Estos pasos son:

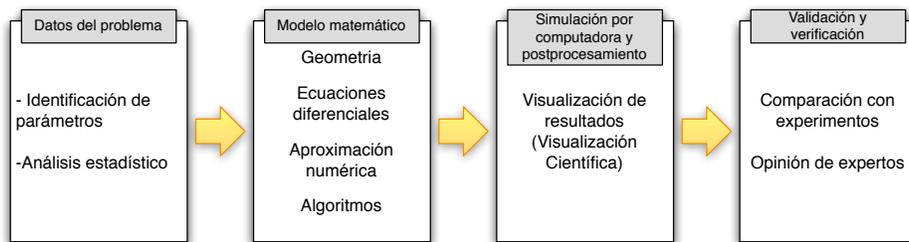


Figura 1.1: Pasos en un proceso de computación Científica

Datos del problema: En este paso se identifica el tipo de información que se tiene o que se puede utilizar para el proceso de simulación por computadora. Ya se que los datos se adquieran de instrumentos de medición, de algún proceso de análisis estadístico, de otra simulación, o de la experiencia de los usuarios de la simulación, que son los científicos e ingenieros interesados en estudiar los fenómenos del mundo real.

Modelo matemático: En este paso se elige el modelo que se utiliza para representan el fenómeno del mundo real. La modelación matemática ayuda a describir diferentes aspectos del mundo real, su interacción y su dinámica a través de las matemáticas. Este modelo debe ser lo suficientemente descriptivo para obtener el tipo de aproximación numérica que se utilizará y finalmente poder representar el modelo mediante un algoritmo.

Simulación y postprocesamiento: En este paso se desarrollan y ejecutan los programas, basados en los algoritmos que se obtienen del modelo, para obtener resultados. Los datos se procesan para ser presentados gráficamente a los usuarios, es decir, se someten a un proceso de visualización científica.

Validación y verificación : Se somete a un proceso de comparación para determinar si los resultados son correctos. Este paso es uno de los mas difíciles de realizar en el proceso de simulación. Generalmente se comparan con resultados analíticos, experimentales o por la opinión de expertos.

El modelo matemático es el que da un soporte confiable a la simulación. Este modelo es la abstracción matemática del fenómeno que se está estudiando [1][2]. Por ejemplo, las ecuaciones diferenciales representan el modelo que se sigue para describir muchos fenómenos físicos. Un punto de importante en la simulación por computadora es su validación, ya que esto determina si los resultados son correctos o no. Si no se tiene cuidado en este punto, se pueden obtener conjeturas erróneas. La validación de los resultados que se obtienen de la simulación dependen tanto del modelo matemático, como de los datos de entrada. Si los datos de entrada que se aplica a un modelo no corresponden con el fenómeno del mundo real.

Actualmente existe una discusión sobre la relevancia de la simulación por computadora dentro del método científico. Algunos autores sugieren una evolución en el método científico, donde además de la observación, teoría y experimentación, ahora se incluya la simulación, experimentación numérica [2][3][4]. Otros son más conservadores comentando que el método científico es una guía para desarrollar un proyecto confiable de simulación por computadora [5][6], y otros autores comentan que lo importante es el modelo matemático sobre el cual se basa la simulación [1]. Sea cual sea el punto de vista, es un hecho que para estudiar muchos fenómenos naturales cuya experimentación "tradicional" resulta imposible de realizar, la experimentación mediante computadoras (o simulación) es un medio eficiente que nos permite y permitirá resolver conjeturas importantes, siempre que el modelo matemático sea consistente.

Esto es, existen una gran cantidad de problemas científicos y de ingeniería tan complejos que sólo pueden resolverse de forma numérica.

Como se ha visto en trabajos como el de [2][7][8], se ha llegado al planteamiento de muchos problemas en ciencias e ingeniería, cuya experimentación “tradicional” resulta difícil o imposible de realizar. La experimentación mediante computadoras es un medio eficiente que nos permite y permitirá resolver conjeturas importantes. Esto es, existe una gran cantidad de problemas científicos y de ingeniería tan complejos que sólo pueden resolverse de forma numérica. Varias de estas soluciones numéricas requieren de un gran poder computacional en CPU, memoria o capacidad de almacenamiento. Estos problemas caen en las siguientes categorías:

- Física y química cuántica, mecánica estadística y física relativista.
- Cosmología y astrofísica.
- Dinámica computacional de fluidos y turbulencias.
- Diseño de materiales y superconductividad.
- Biología, farmacología, secuencias del genoma, ingeniería genética, modelado de células, plegado de proteínas y actividad de enzimas.
- Medicina, modelado de órganos y esqueleto humano.
- Modelado climático y del medio ambiente.

Estos problemas se han denominado *los grandes retos para las ciencias de la computación* y se publicaron hacia finales de la década de 1980 por Levin [9]. Más aún, en 2005, un comité de centros de investigaciones, convocado por Microsoft¹ realizaron el documento *Toward Science to 2020* [8][10] donde se definen los lineamientos, estrategias, cambios y potenciales de las ciencias de la computación y disciplinas afines en la investigación científica para los próximos doce años.

Como ya se han mencionado, nuevas áreas del conocimiento se están enfocando en el uso de simulación por computadora para sus investigaciones, como son biología y genética. Sin embargo, aún quedan muchos problemas que resolver en las disciplinas que usan a la computación científica como una herramienta cotidiana, como lo son física y química cuántica.

Las ecuaciones diferenciales de Schrödinger y Dirac se utilizan para describir a los sistemas de mecánica cuántica no relativistas y relativistas². Estas ecuaciones se llaman ecuaciones de onda y sus soluciones, funciones de onda. Una de las propiedades principales de algunos sistemas cuánticos es que tienen asociados niveles de energía discretos o un espectro discreto. Esta característica se aprecia en los problemas del oscilador armónico y átomo de hidrógeno. Este tipo de espectro se asocia a los estados

¹Microsoft Research Cambridge.

²En este trabajo no abordamos la solución a la ecuación de Klein-Gordon.

ligados del sistema. Sin embargo, en muchos sistemas cuánticos, aparecen también niveles de energía continuos o espectros continuos. Ejemplos muy sencillos de estos sistemas son la partícula libre o el problema del pozo cuadrado. En este tipo de sistemas, los niveles de energía continuo están asociados a los estados no ligados.

Las funciones de onda tienen una interpretación probabilista, es decir, el valor absoluto al cuadrado de una función de onda en el punto x , la expresión $|\psi(x)|^2$ se interpreta como la probabilidad de encontrar a una partícula en la vecindad de x . Debido a esta interpretación probabilística se ha impuesto la restricción de que las funciones de onda deben de ser cuadráticamente integrables. Sin embargo, pocos sistemas cuánticos tienen soluciones cuadráticamente integrables de manera analítica. Esto es, encontrar soluciones a las ecuaciones de Schrödinger o Dirac que sean cuadráticamente integrables, es una tarea difícil desde el punto de vista analítico. La solución a este problema se ha enfocado en 3 direcciones principales. La primera es el desarrollo de herramientas matemáticas para obtener, de manera analítica, el espectro y las soluciones. La segunda es desde el punto de vista físico, donde se ha contemplado la posibilidad de hacer extensiones a la teoría [11][12]. La tercera es el desarrollo de técnicas numéricas que involucran el uso de algoritmos con el objetivo de aproximar las soluciones y obtener los espectros del sistema.

Una forma de obtener las funciones de onda cuadráticamente integrables es construyendo paquetes de onda. Un paquete de onda es una superposición de soluciones ortogonales asociadas al espectro del sistema. También pueden verse como una expansión de Fourier, donde se tiene un sistema de soluciones base que forman a la solución final. Una forma general para expresar un paquete de onda, que incluye a las regiones de energía donde se tiene un espectro continuo y donde se tiene un espectro discreto, es como se presenta en el artículo clásico de Goldberg, Schey y Schwartz [13]:

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t} u_n(x) + \int_{\mathbb{E}} a(k) e^{-iE(k)t} u_k(x) dk \quad (1.1)$$

En esta ecuación los coeficientes a_n y $a(k)$ están definidos como:

$$\begin{aligned} a_n &= \langle u_n, \psi(x, 0) \rangle \\ a(k) &= \langle u(k), \psi(x, 0) \rangle, \end{aligned}$$

donde, $\psi(x, 0)$ es el estado inicial del sistema, y las funciones $u_n(x)$ y $u_k(x)$ son las soluciones, para los niveles de energía de los espectros discretos y continuos, respectivamente.

Esta forma de construir el paquete de onda se realiza con la superposición de soluciones estacionarias, debido a que se obtiene la base de funciones para el paquete de onda, y estas funciones son independientes del tiempo. Entonces, para obtener un paquete de onda de esta manera, se debe calcular primero el espectro, las soluciones asociadas a estos niveles de energía, y después encontrar las soluciones propias de

cada nivel de energía, que forman la base de funciones que nos interesa. Evidentemente las soluciones base deberán cumplir con condiciones iniciales o en la frontera, dependiendo del sistema cuántico con el que se trabaje.

Desafortunadamente, este enfoque presenta complicaciones al hacer las computaciones para obtener el espectro y las soluciones que complan las condiciones a la frontera que dicte el sistema con el que se trabaje. Hallar el espectro de un sistema cuántico es factible cuando se trata de un sistema con estados ligados [14][15][16]. Sin embargo, cuando se trabaja con sistemas con estados no ligados (con potenciales singulares), o estados coherentes, resulta difícil su manejo [17][18][19][20][21][22][23].

Por esta razón, la mayoría de las construcciones numéricas de los paquetes de onda se hace integrando las ecuaciones de movimiento con respecto al tiempo. Esto permite estudiar las propiedades dinámicas del sistema. Sin embargo, esta manera de simular el paquete de ondas mantiene oculto las propiedades que pudiesen aprovecharse del estudio del espectro del sistema y que pueden ser de utilidad en la explicación de fenómenos que aparezcan en el sistema, por lo que resulta deseable obtener las propiedades espectrales de los sistemas cuánticos y las soluciones del sistema.

En el estudio de los sistemas descritos por ecuaciones diferenciales de Schrödinger y Dirac se puede utilizar la teoría regular y singular de Sturm-Liouville para obtener las propiedades espectrales del sistema y las soluciones que sean cuadráticamente integrables. El operador diferencial de Sturm-Liouville tiene la ventaja de poder hacer extensiones cuando el sistema presenta espectro continuo utilizando la teoría de Weyl, la cual consiste en manejar el problema singular de Sturm-Liouville. Esto da como consecuencia el manejo de la función espectral y que puede ayudar a la explicación de comportamientos como las resonancias, estados metaestables o estados coherentes [18][19][22].

Particularmente, en la teoría singular de Sturm-Liouville, conocida también como teoría de Weyl, aparece la función m . Esta función permite obtener información relacionada al problema singular que se está resolviendo y además permite construir una solución cuadráticamente integrable para cada valor propio complejo con la parte imaginaria distinta de cero. De las propiedades de la función m de algún sistema particular, se puede obtener una clasificación de soluciones del problema singular de Sturm-Liouville. Esta clasificación se obtiene a partir de las propiedades geométricas del mapeo del eje real al m -plano. En esta clasificación se obtiene que todas las soluciones del problema diferencial son cuadráticamente integrables o sólo existe una solución cuadráticamente integrable asociada al problema diferencial.

Los problemas computacionales que se tienen cuando se desea generar un paquete de onda desde el punto de vista de soluciones estacionarias son: obtener el espectro — aunque bien podría ser de manera analítica —, manejo del espectro, y la construcción de las funciones asociadas a cada nivel de energía válido del sistema. Si tomamos el enfoque del problema singular de Sturm-Liouville (teoría de Weyl) contamos con la herramienta matemática para trabajar con sistemas que tienen espectros continuos. Una característica importante de la función m es que su parte imaginaria está asociada

con la función espectral ρ del sistema descrito por el problema de Sturm-Liouville. Esta función ρ tiene la propiedad de ser una función monótona no decreciente.

Si se encuentra la función espectral ρ , que es monótona no-decreciente, se puede cambiar la construcción del paquete de onda de una integral de Riemann a un integral de Stieltjes. Esto es, el paquete de onda lo podríamos reescribir como

$$\Psi(x) = \int a_k u_k d\rho(k) \quad (1.2)$$

donde a_k es el coeficiente de Fourier asociado a la solución u_k . Además se puede aprovechar la integral de Stieltjes como un método numérico, ya que, es bien conocido que por el teorema de valor medio de la integral de Stieltjes [24][25][26], la integral queda como la diferencia de los límites de integración evaluados en la función espectral, multiplicados por una constante K , es decir

$$\int_a^b f(\lambda) d\rho(\lambda) = K(\rho(b) - \rho(a)) \quad (1.3)$$

Esto es, la solución queda completamente dependiente de la función espectral. Además, desde el punto de vista de interpretación se tiene la ventaja de que la integral de Stieltjes es equivalente a

$$\int f(\lambda) d\rho(\lambda) = \int f(\lambda) \rho'(\lambda) d\lambda \quad (1.4)$$

Lo que indica que la parte del integrando se multiplica por la derivada del integrador, que es la función espectral; y la derivada de la función espectral se le conoce como la función de densidad espectral. En otras palabras el integrando, que sería la solución de un nivel de energía multiplicada por un coeficiente de Fourier, se multiplica por la función de densidad espectral, lo que da un mejor manejo del espectro del sistema (sin importar si el espectro es continuo o discreto).

Trabajos que utilizan los problemas regulares y singulares de Sturm-Liouville aplicados a la ecuación de Schrödinger han aparecido desde la década de 1970 para hallar el espectro y construir los paquetes de onda [19][18]. Hacia la última década del siglo XX los trabajos se centraron en encontrar numéricamente el espectro para distintos potenciales en la ecuación de Schrödinger [14][16]. Utilizar el operador de Sturm-Liouville en la ecuación de Dirac se ha tratado a nivel matemático en diversos trabajos —que van, desde el libro de Levitan [27], hasta los últimos trabajos de Brown y Evans sobre extensiones a la teoría de Weyl para sistemas Hamiltonianos, haciendo énfasis en la extensión matricial de la función m [28] [27] [16]. Sin embargo, se han propuesto mecanismos para utilizar el problema singular de Sturm-Liouville sobre la ecuación de Dirac sin necesidad de hacer estas extensiones, ya que se puede verificar que mucho del trabajo, el cual se centra en el manejo de la función m de Weyl-Titchmarsh, consisten en formar la función espectral y, consecuentemente, hallar el espectro del sistema.

Afortunadamente se han realizado trabajos para obtener soluciones numéricas de sistemas cuánticos descritos con la ecuación de Schrödinger, con espectros discretos,

utilizando la teoría de Weyl-Titchmarsh [18] [29][14][30] [31][32]. La complicación para extender este método a los sistemas relativistas, es que las soluciones de la ecuación de Dirac son vectores solución llamados espinores; y su manejo e interpretación aún causa problemas [20] [33] [34] [35]. Una parte sustancial de esta expansión, consiste en el manejo de la función m de Weyl-Titchmarsh para el caso de la ecuación de Dirac, para saber si se mantiene, o se extiende a una representación matricial [28][27].

También se han realizado diversos trabajos utilizando la teoría de Weyl para sistemas cuánticos descritos con la ecuación de Schrödinger, que cuentan con estados no ligados o con espectros continuos, generalmente asociados a potenciales singulares. Estos trabajos, además de manejar de manera favorable estos potenciales, dan mayores herramientas matemáticas de interpretación de resultados debido al uso de la función espectral [18][19].

El objetivo principal de este trabajo es realizar simulaciones de paquetes de onda para sistemas cuánticos sin importar si el sistema contiene estados ligados o no ligados. Estas simulaciones se realizan tomando como referencia las propiedades que se obtienen de la teoría de Weyl. Esto implica obtener numéricamente a la función espectral ρ , función m de Weyl-Titchmarsh y las funciones solución del sistema cuántico que permitan formar a la función m . Finalmente tener las soluciones numéricas para construir el paquete de ondas como una integral de Stieltjes como si fuera una construcción basada en soluciones estacionarias.

Este documento está dividido en seis capítulos y un apéndice. En el primer capítulo hacemos una discusión de los paquetes de onda para las ecuaciones de Schrödinger y Dirac y se plantea la solución como una integral de Stieltjes. En el siguiente capítulo se hace una discusión de la transformación de Möbius y de las integrales de Stieltjes para hacer un estudio adecuado de la función m y para construir numéricamente la superposición de soluciones con referencia a la función de densidad espectral ρ . En el siguiente capítulo se presenta la teoría de Weyl, en la cual basamos nuestro estudio, y presentamos nuestros resultados sobre los estudios geométricos sobre la función m de Weyl-Titchmarsh, lo que nos permite tener una familia de soluciones para el sistema de ecuaciones diferenciales que nos permitan obtener este tipo de funciones. El cuarto capítulo contiene varios ejemplos de simulación de paquetes de ondas para distintos sistemas cuánticos en una dimensión, para tomarlos como marco de referencia y probarlos con la solución numérica propuesta en esta tesis. En el siguiente capítulo se da una discusión final del tema, tomando como referencia resultados obtenidos y las extensiones a corto, mediano y largo plazo de este trabajo. El apéndice versa sobre las técnicas de visualización de funciones complejas que hemos utilizado en este trabajo para estudiar el comportamiento de la transformación de Möbius.

Capítulo 2

Paquetes de onda

En mecánica cuántica los sistemas se describen mediante ecuaciones de onda. Estas ecuaciones son las ecuaciones de Schrödinger y Dirac para sistemas cuánticos relativistas y sistemas cuánticos no relativistas. Una característica importante es que toda la información del sistema cuántico se pueden obtener a partir de la funciones de onda solución. Las funciones solución a las ecuaciones de Schrödinger y Dirac tienen diferentes propiedades y restricciones. Por un lado, una de las principales restricciones es que las soluciones sean cuadráticamente integrables, debido a la interpretación probabilística que se le otorga. Sin embargo, son pocos los sistemas donde se pueden encontrar las soluciones analíticas que pertenezcan al espacio de soluciones cuadráticamente integrables. Por otro lado, las funciones de onda pueden describir combinaciones de diferentes estados, es decir, superposición de estados. Una función formada por superposición de estados se le conoce como paquete de ondas. Esto es, un paquete de ondas es una superposición de ondas. En mecánica ondulatoria se sabe que el paquete envuelve un número arbitrario de ondas. Una función cuadráticamente integrable puede formarse a partir de una superposición de funciones mediante una expansión de Fourier, aunque las funciones no sean cuadráticamente integrables. Por tanto, es posible construir un paquete de ondas que sea la solución que cumpla con la restricción y que se forme a partir de las soluciones a las ecuaciones de la mecánica cuántica que no sean cuadráticamente integrables.

En este capítulo discutiremos el paquete de onda para sistemas cuánticos. Iniciaremos con una discusión general de la herramienta matemática que se utiliza en mecánica cuántica para trabajar con las funciones de onda y que nos será útil para construir los paquetes de onda. Posteriormente, se abordarán las ecuaciones de Schrödinger y Dirac, se discutirán la manera de obtener información relativa al sistema a partir de las soluciones y la construcción de los paquetes de onda cuánticos. Después revisaremos los modelos que se utilizan para construir las simulaciones de los paquetes de

onda, analizando las ventajas y desventajas. Finalmente, como producto de este análisis proponemos el enfoque de integrales de Stieltjes para resolver el problema.

2.1 Introducción

Los inicios de la mecánica cuántica se basan en la búsqueda de una explicación a fenómenos que no podían explicarse a inicios del siglo XX con la, hoy llamada, mecánica clásica como la llamada catástrofe ultravioleta, o el problema del espectro del átomo de hidrógeno. Afortunadamente los trabajos de Plank, Luis de Broglie y los resultados experimentales de Davisson y Germer se pudo establecer el comportamiento ondulatorio de las partículas. Esto es, se pudo establece la dualidad onda-partícula: las partículas se comportan como ondas y las ondas se comportan como partículas.

A finales de 1925, durante la presentación de un seminario, en Zurich, dado por Schrödinger sobre el trabajo de de Broglie, se le cuestionó sobre la falta de una ecuación de onda. Esto le llevó al desarrollo de la ecuación de onda para la mecánica cuántica no relativista. Esta ecuación se estableció como una ecuación diferencial de segundo orden, que puede explicarse como un operador diferencial de Sturm-Liouville.

Desde los inicios en el desarrollo de la mecánica cuántica un problema fue la interpretación de la función de onda. Hasta la fecha el significado de la función de onda como un punto controversial en la comunidad científica [36]. Posiblemente una razón a que no se ha esclarecido el significado es que mucho del desarrollo realizado en el campo de la física y química cuántica se ha orientado hacia las aplicaciones y la solución de problemas abiertos de la física nuclear en lugar de resolver las implicaciones ontológicas de estas ecuaciones y sus soluciones [36].

2.2 Análisis de Fourier de las funciones de onda

El análisis de Fourier es una de las herramientas principales en distintas áreas como física, química, matemáticas e ingeniería. En mecánica cuántica el análisis de Fourier se ha utilizado para obtener soluciones y dar interpretaciones a la ecuación de Schrödinger. Además es un sustento matemático para entender como las funciones de onda pueden describir simultáneamente la propiedad de localización y la distribución de momento en una partícula.

La parte esencial en el análisis de Fourier es que mediante la superposición de funciones puede escribir una función arbitraria. Esto se debe a que las funciones involucradas en la superposición forman una base del espacio de funciones. Funciones base esenciales son las funciones trigonométricas y las funciones gaussianas.

Iniciemos considerando las funciones periódicas y las series de Fourier asociadas. Sea un número $\lambda > 0$, entonces se pueden definir los números

$$k_n = n \frac{\pi}{\lambda}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (2.1)$$

y las correspondientes funciones

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} e^{ik_n x} = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} (\cos(k_n x) + i \operatorname{sen}(k_n x)). \quad (2.2)$$

Desde el punto de vista de las aplicaciones de mecánica cuántica, nos referiremos a $\psi_n(x)$ como una onda plana estacionaria con número de onda k .

Las funciones $\psi_n(x)$ tienen un periodo en 2λ , por lo que podemos considerar el intervalo $[-\lambda, \lambda]$. La suma trigonométrica de Fourier se puede construir a partir del conjunto de funciones Φ de la siguiente manera:

$$\psi(x) = \sum_{n=-N}^N c_n \phi_n(x). \quad (2.3)$$

La función Φ es periódica en λ , si se desea otra función se debe considerar un conjunto Φ con distintos valores para λ . El conjunto de funciones que puede generarse a partir de la superposición de ondas planas es grande.

2.2.1 Funciones cuadráticamente integrables

Como se ha comentado, en mecánica cuántica se busca que las funciones sean cuadráticamente integrables, lo cual es difícil de obtener de manera analítica. Afortunadamente, un resultado fundamental en matemáticas es que una función cuadráticamente integrable en el intervalo $[-\lambda, \lambda]$ se puede aproximar por una superposición de ondas planas.

Definición 1 Se dice que una función compleja ψ es cuadráticamente integrable en el intervalo $[a, b]$ si

$$\int_a^b |\psi(x)|^2 dx < \infty \quad (2.4)$$

El conjunto de todas las funciones cuadráticamente integrables en el intervalo $[a, b]$ forman el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2([a, b])$.

Series de Fourier de una función cuadráticamente integrable Sea ψ una función cuadráticamente integrable en el intervalo $[-\lambda, \lambda]$. Entonces

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \phi_n(x), \quad c_n = \int_{-\lambda}^{\lambda} \overline{\phi(x)} \psi(x) dx.$$

Esta suma infinta de funciones trigonométricas se llama *serie de Fourier*. Los coeficientes c_n , o amplitudes, son cuadráticamente sumables, es decir

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx < \infty.$$

2.2.2 Convergencia de las series de Fourier

Cuando se habla de convergencia de las series de Fourier se debe entender como una convergencia en el promedio

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \int_{-\lambda}^{\lambda} \left| \sum_{n=-m}^m c_n \phi_n(x) - \psi(x) \right|^2 dx = 0.$$

La convergencia en la media no implica que la suma converga para un valor fijo x . Es más, esta observación es importante si la función tiene puntos de discontinuidad.

Una función cuadráticamente integrable no necesita ser necesariamente continua, como lo que ocurre con la función

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{para } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{otro caso.} \end{cases}$$

para $a \in (0, \lambda]$. Se observa que esta función es cuadráticamente integrable y tiene una discontinuidad en los puntos $-a$ y a .

2.3 El espacio de Hilbert de las funciones cuadráticamente integrables

El conjunto $\mathcal{L}^2([a, b])$ de todas las funciones cuadráticamente integrables en un intervalo $[a, b]$ tiene la estructura del espacio de Hilbert. En el contexto de mecánica cuántica, las funciones de onda son elementos de un espacio de Hilbert adecuado. Así, los espacios de Hilbert son un elemento fundamental en el aparato matemático moderno de la mecánica cuántica.

2.3.1 Espacio lineal

El conjunto $\mathcal{L}^2([a, b])$ de las funciones cuadráticamente integrables tiene la estructura de un espacio lineal. Es decir, tiene una base de elementos que son linealmente independientes y todo elemento del espacio de Hilbert puede formarse a partir de una combinación lineal, o superposición, de elementos de la base.

Sin embargo hay que tener cuidado en este punto respecto a los espacios de Hilbert que se utilizan en mecánica cuántica, debido a que las funciones de onda plana no son cuadráticamente integrables, y estas en realidad forman una base de un espacio mayor que contiene al espacio de Hilbert, denominado espacio de Banach [11].

2.3.2 Norma y producto escalar

Un espacio de Hilbert se caracteriza por tener una norma y un producto escalar asociado.

En el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2([a, b])$ la norma de una función ψ se define como

$$\|\psi\| = \left(\int_a^b |\psi(x)|^2 dx \right)^{1/2} \quad (2.5)$$

Así, la distancia entre dos funciones ψ y φ está dada por

$$d(\varphi, \psi) = \|\varphi - \psi\|. \quad (2.6)$$

El producto interno es una operación que asocia a dos elementos de un espacio con un escalar. El producto interno de dos funciones ψ y φ que pertenecen al espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2([a, b])$ se denota por $\langle \psi, \varphi \rangle$ y se define como

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \int_a^b \overline{\psi(x)} \varphi(x) dx \quad (2.7)$$

El producto escalar tiene algunas propiedades de interés como

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi, \psi \rangle.$$

Note que el producto escalar es antilineal en el primer argumento y lineal en el segundo

$$\langle a\psi_1 + b\psi_2, \varphi \rangle = \bar{a}\langle \psi_1, \varphi \rangle + \bar{b}\langle \psi_2, \varphi \rangle \quad (2.8)$$

$$\langle \psi, a\varphi_1 + b\varphi_2 \rangle = a\langle \psi, \varphi_1 \rangle + b\langle \psi, \varphi_2 \rangle. \quad (2.9)$$

Mas aún

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \overline{\langle \varphi, \psi \rangle}.$$

Además se puede establecer la desigualdad de Cauchy-Schwarz

$$|\langle \psi, \varphi \rangle| \leq \|\psi\| \|\varphi\|. \quad (2.10)$$

Esta desigualdad se mantiene siempre que $\psi = \alpha\varphi$, para $\alpha \in \mathbb{C}$.

2.3.3 Ortogonalidad

Dos funciones ψ y φ en un espacio de Hilbert son ortogonales si el producto interno de ambas es cero, es decir $\langle \psi, \varphi \rangle = 0$. Por tanto, son funciones linealmente independientes. Se dice que un conjunto de funciones $\{\theta_i\}$ son ortogonales si $\langle \theta_i, \theta_j \rangle = \delta_{ij}$. Donde $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ y $\delta_{ij} = 0$ en otro caso.

Un conjunto ortonormal en un espacio de Hilbert \mathcal{H} es una base sí y sólo sí se cumple la propiedad de completitud. La completitud significa que cada vector $\psi \in \mathcal{H}$ puede escribirse como una combinación lineal de los vectores base en la forma

$$\psi = \sum_i c_i \theta_i, \quad c_i = \langle \theta_i, \psi \rangle.$$

La suma infinita converge con respecto a la norma del espacio de Hilbert. Esto es

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\| \sum_{i \leq N} c_i \theta_i - \psi \right\| = 0.$$

2.4 Las ecuaciones de Schrödinger y Dirac

Las ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden de una variable real, son de uso común para la representación de sistemas en distintas áreas de física y química. Algunas ecuaciones diferenciales de segundo orden son una consecuencia de leyes de la física, o como consecuencia de algún procedimiento matemático para resolver otras ecuaciones como las de Laplace o Poisson [37]. Inevitablemente en las soluciones figura la aparición de valores complejos.

Si se consideran un par de ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden cuyos coeficientes sean valores escalares

$$\frac{dy(t)}{dt} = a(t)y(t) + b(t)x(t) \quad (2.11)$$

$$\frac{dx(t)}{dt} = c(t)y(t) + d(t)x(t), \quad (2.12)$$

entonces este par de ecuaciones puede expresarse en una forma matricial como

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} y(t) \\ x(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(t) & b(t) \\ c(t) & d(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y(t) \\ x(t) \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Si expresamos la ecuación (2.13) como

$$\frac{dZ(t)}{dt} = M(t)Z,$$

donde Z es el vector de las funciones $y(t)$ y $x(t)$ y M es la matriz de coeficientes, entonces podemos expresar a la solución Z como

$$Z = e^{M(t)}Z_0 \quad (2.14)$$

donde Z_0 son las condiciones iniciales, esto es $x(0)$ y $y(0)$. Sin embargo, a pesar de que hay diversas formas de calcular la matriz exponencial, depende mucho de las propiedades de la matriz para obtener una solución adecuada. Un excelente trabajo donde explican los métodos para la computación de la matriz exponencial se puede encontrar en [38].

Particularmente, para el caso de una matriz antidiagonal M ,

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ \beta & 0 \end{pmatrix}$$

la matriz exponencial queda de la forma

$$e^M = \begin{pmatrix} \cosh \sqrt{\alpha\beta} & \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\beta}} \sinh \sqrt{\alpha\beta} \\ \frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt{\alpha}} \sinh \sqrt{\alpha\beta} & \cosh \sqrt{\alpha\beta} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

En mecánica cuántica se utilizan las ecuaciones de Schrödinger y Dirac para describir sistemas cuánticos no relativistas y relativistas, respectivamente. Afortunadamente, para ambos casos, las ecuaciones pueden representarse en formas matriciales de 2×2 en una dimensión.

2.4.1 La ecuación de Schrödinger

Una de las ecuaciones más importantes en el desarrollo científico y tecnológico del siglo XX es la ecuación de Schrödinger. Erwin Schrödinger publica esta ecuación de onda en la primera mitad de 1926 [39], en respuesta a una pregunta hecha por Derby en un seminario, que dió en Zurich en noviembre de 1925, sobre los resultados de De Broglie [36], donde se cuestionaba que se hablaba mucho de ondas, pero que no había una ecuación de onda.

La ecuación de Schrödinger se expresa como sigue

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(x, t) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.16)$$

donde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ y n es la dimensión del espacio de configuración o espacio posición. Si consideramos una dimensión en el espacio de configuración, la ecuación (2.16) se escribe como

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x, t) + V(x, t) \psi(x, t) \quad (2.17)$$

Consideremos el caso en que el potencial V sólo depende de x , la ecuación se resuelve con respecto a x tal que la solución $\psi(x, t)$ se puede escribir como

$$\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x, t_0) = e^{-iEt/\hbar} \phi(x).$$

Entonces la ecuación de Schrödinger puede escribirse en términos de una función independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V(x) \phi(x) = E \phi(x). \quad (2.18)$$

Así, la ecuación de Schrödinger para el caso estacionario (2.18), puede escribirse en notación de una matriz 2×2 , y si consideramos a la constante \hbar y a la masa m de la partícula como uno, obtenemos la siguiente representación para esta ecuación de onda

$$\frac{dZ(x)}{dx} = \begin{pmatrix} 0 & V(x) - E \\ 1 & 0 \end{pmatrix} Z(x) \quad (2.19)$$

donde $V(x)$ es el potencial del sistema, y E el nivel de energía. Si introducimos el factor

$$k = (V(x) - E)^{1/2}$$

según el resultado mostrado en (2.15), cuando k es constante, la solución de la ecuación (2.19) tiene la forma

$$Z(x) = \begin{pmatrix} \cosh k(x - x_0) & k \sinh k(x - x_0) \\ \frac{1}{k} \sinh k(x - x_0) & \cosh k(x - x_0) \end{pmatrix} Z(x_0) \quad (2.20)$$

Donde $Z(x_0)$ tiene los valores de las condiciones iniciales del sistema. Sin embargo, esta solución es buena cuando $V(x)$ es constante. En otro caso, resulta en una aproximación a la solución muy cruda. La solución numérica aproxima la solución $Z(x)$,

para ello tenemos dos opciones. Por un lado, una aproximación a la solución a (2.19) es considerar a $k = (V(x) - E)^{1/4}$, como se presenta en [40][41], esta aproximación resulta de la aplicación del método JWKB, y en ocasiones se deben hacer cambios en las exponenciaciones que involucra k , en ocasiones pasar de $1/4$ a $1/2$ dependiendo si k representa a la amplitud de onda de la solución aproximada.

Por otro lado, una aproximación se puede desarrollar definiendo a

$$\varphi(x, x_0) = \int_{x_0}^x (V(x) - E) dt,$$

tal que $Z(x)$ se escribe como

$$Z(x) = \begin{pmatrix} \cos \varphi(x, x_0) & -\text{sen} \varphi(x, x_0) \\ \text{sen} \varphi(x, x_0) & \cos \varphi(x - x_0) \end{pmatrix} Z(x_0) \quad (2.21)$$

La cual establece una rotación en el espacio fase. Este método se describe en [42] [43] [12] [44].

Afortunadamente, cualquiera que sea la matriz de aproximación de la solución existen un procedimiento estándar para corregir el resultado. Supongamos la matriz de coeficientes M puede dividirse en la suma de dos matrices A y B , es decir

$$M = A + B,$$

donde A es la matriz con las soluciones aproximadas y B es la corrección. Las divisiones pueden ser de cualquier tipo, tal que la matriz de corrección no necesariamente debe ser pequeña.

Supongamos ahora que se cumple la siguiente condición auxiliar

$$\frac{dU(x)}{dx} = A(x)U(x)$$

para la condición inicial $U(x_0) = \mathbf{I}$. Entonces al tratar de escribir como el producto de dos matrices $Z(x) = U(x)V(x)$, se tiene que $V(x)$ de resolver la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{dV(x)}{dx} = U(x)^{-1}B(x)U(x) V(x) \quad (2.22)$$

sujeta a las mismas condiciones iniciales que $Z(x)$.

2.4.2 La ecuación de Dirac

La ecuación de Dirac es una ecuación de onda para la mecánica cuántica relativista. P.A.M. Dirac publicó esta ecuación de onda en 1928 [45]. Dirac plantea esta ecuación agregando la corrección relativista. Este tipo de corrección no era nuevo ya que la ecuación Klein-Gordon también la incorpora [46]. Sin embargo, un hecho trascendente es que Dirac plantea que la solución a la ecuación de onda que propone es "lineal o

de grado uno", lo que arrojó una solución basada en un vector de funciones, al que se le denominó espinor, y los coeficientes del hamiltoniano son matrices. Las soluciones de la ecuación de Dirac incluyen de manera implícita el manejo del spin, propiedad que Pauli incluía de manera explícita en las soluciones relativistas obtenidas por las soluciones de Klein-Gordon. Este manejo del spin permite que se puedan describir partículas y antipartículas.

A diferencia de la ecuación de Schrödinger, la ecuación de Dirac es un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, donde la solución es el vector de funciones solución, llamado espinor, y no la primera solución del caso no relativista dado en (2.20). Esto se debe a que, al expresar la ecuación de Dirac como un hamiltoniano, tiene coeficientes que son matrices en vez de valores escalares, como ocurre en el caso no relativista.

La ecuación de Dirac se escribe a partir del hamiltoniano

$$E\Psi = H\Psi \quad (2.23)$$

$$H = i\sigma_2 \frac{d}{dx} + m_0 c^2 \sigma_3 + V(x)\mathbf{1} \quad (2.24)$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

Donde $E \in \mathbb{R}$ y representa la energía; H es el operador hamiltoniano (u operador de energía), definido en (2.24); Ψ es el vector de las funciones de onda solución del sistema, y se le llama espinor; $\mathbf{1}$ la matriz unitaria y σ_1, σ_2 y σ_3 son las matrices de Dirac:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

Si la multiplicamos $-i\sigma_2$ por la derecha en ambos lados de la ecuación (2.23) y despejamos el término que involucra d/dx , entonces obtenemos la representación:

$$\frac{d}{dx}\Psi = (\sigma_1 m_0 c^2 + i\sigma_2 E - i\sigma_2 V(x)) \Psi.$$

Se puede ver que la ecuación de Dirac (2.23), puede describirse como un par de ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas, escogiendo las matrices de Dirac como se muestra en la ecuación (2.24) de la siguiente forma

$$H = i\sigma_2 \frac{d}{dx} - m_0 c^2 \sigma_3 - V(x)\mathbf{1}$$

podemos obtener la forma matricial de la ecuación de Dirac como sigue[43][44]:

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & m_0 c^2 + (E - V) \\ m_0 c^2 - (E - V) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

Con lo cual obtenemos una ecuación independiente del tiempo. Esta deducción se puede encontrar en [47].

En una dimensión, la ecuación de Dirac, para el caso estacionario donde el potencial es independiente del tiempo, puede escribirse en forma matricial como

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = \begin{pmatrix} 0 & m_0 - (V(x) - E) \\ m_0 + (V(x) - E) & 0 \end{pmatrix} \Psi(x) \quad (2.28)$$

Donde m_0 es la masa en reposo y $V(x)$ el potencial independiente del tiempo. Con las sustituciones

$$\phi = x \sqrt{m_0^2 - (V - E)^2}, \quad \sigma = \sqrt{\frac{m_0 - (V - E)}{m_0 + (V - E)}}$$

podemos escribir la solución de la ecuación (2.28) como

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cosh \phi & \sigma \sinh \phi \\ \sigma^{-1} \sinh \phi & \cosh \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(x_0) \\ \psi_2(x_0) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Afortunadamente, para el caso de los potenciales independientes del tiempo, las funciones de onda, dependientes del tiempo $\psi(x, t)$, puede describirse en función de la solución estacionaria multiplicada por un componente temporal.

$$\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x, t_0) \quad (2.30)$$

2.4.3 Relación de incertidumbre de Heisenberg

Un concepto fundamental en el desarrollo de la teoría cuántica es la dualidad onda partícula. Es decir, una partícula se comporta como onda y una onda como partícula. La dualidad onda-partícula es el origen del famoso principio de incertidumbre de Heisenberg. El principio de relación de incertidumbre establece que al localizar una partícula en una pequeña región del espacio, hace que el momento asociado a la partícula sea desconocido, y viceversa, si se conoce el momento de una partícula, entonces la posición se desconoce. Esto es, se puede conocer la posición o el momento de una partícula, pero no ambas de manera simultánea. Este principio se establece como

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.31)$$

donde Δx es la incertidumbre en la posición, Δp es la incertidumbre en el momento y \hbar es la constante de Plank dividida entre 2π .

2.4.4 El espacio de Hilbert de las funciones de onda

En mecánica clásica, el estado de una partícula en un tiempo t se define por una posición y un momento, lo que determina un punto en el espacio fase. Sin embargo, la relación de incertidumbre de Heisenberg el estado de una partícula se mantiene en

una región del espacio fase. En general el estado de un sistema físico se considera como un conjunto de propiedades que dan la descripción completa del sistema. En mecánica cuántica la función de onda contiene toda la información sobre las distribuciones de la posición y momento de una partícula. Una característica importante es que si se sabe cual es el estado de un sistema en un tiempo $t = 0$, entonces es factible conocer el estado del sistema y las ecuaciones de onda ayudan a determinar el estado en tiempos posteriores. Así, el estado de una partícula se establece con la función de onda y las ecuaciones de onda son las ecuaciones de evolución. Por supuesto hay otras cantidades físicas como masa y carga eléctrica las cuales afectan el comportamiento de la partícula, pero por lo general no se consideran parte del estado. Estas cantidades se mantienen sin cambio en la evolución del sistema, por lo que son cantidades propias del sistemas, más que el estado del sistema.

Entonces para el caso de sistemas cuánticos descritos con la ecuación de Schrödinger, el estado de una partícula en un tiempo t se describe por una función no cero, cuadráticamente integrable.

Para el caso de sistemas cuánticos relativistas, debemos considerar que la función de onda es un espinor. Si consideramos que Ψ es un espinor de dos componentes

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix},$$

entonces si Ψ es cuadráticamente integrable, se debe cumplir con

$$\int |\Psi(x)|^2 dx < \infty. \quad (2.32)$$

Pero sabemos que

$$\begin{aligned} |\Psi(x)|^2 &= \left| \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \right|^2 = \left(\overline{\psi_1(x)}, \overline{\psi_2(x)} \right) \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \\ &= \overline{\psi_1(x)}\psi_1(x) + \overline{\psi_2(x)}\psi_2(x) \\ &= |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Entonces la ecuación (2.32) puede escribirse como

$$\int (|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2) dx = \int |\psi_1(x)|^2 dx + \int |\psi_2(x)|^2 dx < \infty. \quad (2.34)$$

El espinor solución Ψ de la ecuación de Dirac contiene el estado de una partícula y una antipartícula. Entonces (2.34) indica que el estado de una partícula y una antipartícula en una dimensión en un tiempo t se describe por dos funciones cuadráticamente integrables.

Los estados de un sistema en mecánica cuántica se pueden describir como elementos, o si se prefiere vectores, de un adecuado espacio de Hilbert \mathcal{H} . Sean dos elementos $\psi, \phi \in \mathcal{H}$, entonces se dice que ψ y ϕ describen el mismo estado sí y solo sí existe un

escalar $c \in \mathbb{C}$ tal que $\psi = c\phi$. Es decir, los estados físicos corresponden a un subespacio vectorial

$$\{\psi\} = \{c\psi | c \in \mathbb{C}\} \quad (2.35)$$

del espacio de Hilbert, para $\psi \neq 0$. Es decir, no existe una correspondencia uno a uno entre los estados de un sistema cuántico y las funciones de onda.

A pesar de que a un estado cuántico se le pueden asociar todo un subespacio del conjunto de Hilbert de funciones, es conveniente utilizar la función de onda normalizada ψ , es decir $\|\psi\| = 1$, para representar al estado. Además, la evolución temporal que generan las ecuaciones de onda, mantienen invariante a la norma, es decir

$$\|\psi(\cdot, t)\| = \|\psi_0\|. \quad (2.36)$$

El principio de superposición

El principio de superposición establece que dadas dos funciones $\psi, \phi \in \mathcal{H}$, entonces $\varphi = c_1\psi + c_2\phi$ define un posible nuevo estado del sistema. La linealidad del espacio de Hilbert \mathcal{H} se refleja en este principio de superposición.

Sin embargo se debe tener en cuenta que $\varphi_1 = \psi + \phi$ y $\varphi = c_1\psi + c_2\phi$ definen el mismo espacio, sólo si $c_1 = c_2$, es decir que la suma sea multiplicada por un escalar.

2.4.5 La representación estándar

Un aspecto importante en mecánica cuántica es la interpretación estadística que se ha adoptado para la función de onda, donde se toma que dada una función de onda $\psi \in \mathcal{H}$, en el espacio de Hilbert de las funciones cuadráticamente integrables, se considera que $|\psi(x)|^2$ representa la función de densidad de probabilidad [48]. De esta forma, una función de onda que describe a una partícula en algún lugar en el espacio cumple con la condición de normalización

$$\|\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx. \quad (2.37)$$

Una partícula relativista en una dimensión espacial se describe por un espinor de Dirac (de dos componentes) cuadráticamente integrable, como se discutió en la sección 2.4.4, y por la ecuación (2.34) tenemos que

$$\int_B (|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2) dx$$

es la probabilidad de encontrar a la partícula en la región B . La función $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$ se llama la función de densidad de probabilidad de posición.

2.4.6 Observables

Los observables son cantidades como energía, posición o momento que se pueden medir para conocer sobre el estado de un sistema cuántico. En mecánica cuántica, un observable se describe como un operador lineal en el espacio de Hilbert asociado al sistema físico.

El operador de posición

Una cantidad que se relaciona con la posición es el valor esperado de la posición. Supongamos que la función de onda está normalizada, es decir $\|\psi\| = 1$. Entonces, para una partícula moviéndose en una dimensión espacial, el operador de posición se puede escribir como

$$\langle x \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \langle \psi, x\psi \rangle \quad (2.38)$$

o $\langle \psi | x | \psi \rangle$, en la notación de Dirac [49]. Desde el punto de vista matemático si tenemos una función $\xi = x|\psi\rangle$, donde x es un operador y no un valor escalar, entonces la expresión (2.38) es el producto escalar de ψ con ξ , es decir $\langle \psi, \xi \rangle$. El mapeo entre ψ y ξ es lineal en el espacio de Hilbert de las funciones cuadráticamente integrables. Este operador se requiere para obtener información relativa a la posición de la partícula.

Operador de posición El observable de posición para una partícula en una dimensión se representa por el operador de posición x , el cual se define como el operador lineal que multiplica la función de onda ψ con la variable x .

El dominio del operador de posición x es un subespacio del espacio de Hilbert \mathcal{H} de las funciones cuadráticamente integrables, donde cada ψ en el dominio de x es tal que $x\psi \in \mathcal{H}$, es decir¹

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx < \infty$$

El operador de momento

Para una partícula en una dimensión el valor esperado del momento está dado por

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} k |\hat{\psi}(k)|^2 dk. \quad (2.39)$$

Al igual que el operador de posición este operador se puede escribir como $\langle \psi, p\psi \rangle$ ó $\langle \psi | p | \psi \rangle$, donde p es el operador lineal. Si denotamos como $\psi' = \frac{d}{dx}\psi$, utilizando la relación de Fourier-Plancherel podemos escribir la expresión (2.39) como

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} (-i)\psi'(x) dx = \langle \psi, -i\psi' \rangle. \quad (2.40)$$

¹Aquí se utiliza la convención de que el operador y la variable de posición son la misma x .

O bien, si consideramos la notación de Dirac, la ecuación (2.40) se expresa como $\langle \psi | p | \psi \rangle$, y es fácil ver que el operador de momento p para una partícula en una dimensión espacial queda definido como

$$p = -i \frac{d}{dx} \quad (2.41)$$

Y si se desea para más dimensiones, entonces queda como

$$\mathbf{p} = -i(\partial_1, \dots, \partial_n) \quad (2.42)$$

con $\partial_k = \frac{\partial}{\partial x_k}$.

La energía cinética

El operador de Laplace que aparece en la ecuación de Schrödinger se puede escribir como

$$-\Delta = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = - \sum_{i=1}^n \partial_i^2.$$

y como la energía cinética se representa por $p^2/2$, entonces el operador

$$H_0 = -\frac{1}{2}\Delta$$

representa a la observable de energía cinética.

2.4.7 Regla de interpretación

En general en mecánica cuántica sólo se obtienen predicciones probabilísticas de una medición, aún si se conoce exactamente el estado del sistema. La medición de una observable A es un experimento aleatorio, lo que permite que se defina una variable aleatoria que describa los valores numéricos asociados con la observable cada vez que se realice el experimento.

Supongamos que para cualquier momento el estado del sistema físico se representa por un estado normalizado ψ , entonces

$$\langle A \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle$$

es el valor esperado, o valor medio, de la observable A .

La desviación estandar ΔA de una observable A en el estado ψ ,

$$\Delta A \equiv \|(A - \langle A \rangle)\psi\| = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \psi},$$

describe la dispersión de los valores de A alrededor del valor medio $\langle A \rangle$.

Si el estado ψ es un vector propio del operador lineal A , es decir

$$A\psi = a\psi \quad (2.43)$$

para $a \in \mathbb{R}$, entonces el resultado de una medición de A es a con certidumbre, esto es, $\Delta A = 0$. Al conjunto de elementos al que pertenecen los distintos valores de a se le denomina espectro. En este punto hay que ser cuidadosos debido a que muchas características de la teoría cuántica se basan en espectros discretos. Hay operadores cuyos valores propios no pertenecen a un espectro discreto, si no que el resultado de a del problema de la ecuación (2.43) pertenece a un espectro continuo, como lo son el operador de posición y el operador de momento.

Para una observable cuyo espectro es discreto, los únicos valores posibles de una medición son los valores propios.

2.5 Ondas planas y paquetes de onda

Una onda es una oscilación que se propaga desde una fuente. Las ondas transportan energía pero no materia. La suma de ondas o superposición de ondas, forma otra onda. La superposición de ondas se denomina paquete de ondas. El paquete de ondas tiene una serie de atributos como son velocidad de fase, velocidad de grupo y onda envolvente, que resultan de las combinaciones de las propiedades de cada onda en el paquete.

Si el estado de un sistema se describe con una función de onda, las funciones de onda pueden describir combinaciones de diferentes estados, es decir, superposición de estados. Por ejemplo un electrón puede estar en una superposición de diferentes localidades o posiciones. En mecánica cuántica, los paquetes de ondas se forman por superposición de soluciones a las ecuaciones de Schrödinger o Dirac. La superposición de estas soluciones se interpreta como la probabilidad de que la medición de una partícula o partículas en un estado determinado, sean un momento o posición determinado.

2.5.1 Ondas planas

Una onda es una función que tiene distintas propiedades como son amplitud A , longitud de onda λ y periodo de oscilación T . Clásicamente las ondas se describen con las funciones trigonométricas seno y coseno

$$A \operatorname{sen} \left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T} \right), \quad A \operatorname{cos} \left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T} \right),$$

o como una superposición de ambas funciones en el plano complejo para tener la función exponencial $e^{ai\theta} = A \operatorname{cos} \theta + iA \operatorname{sen} \theta$, donde $A = e^a$ y $\theta = \left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T} \right)$.

La noción básica de un paquete de ondas es que es una superposición de diferentes ondas. Esto es, si tenemos un conjunto de ondas, posiblemente infinito, $\Phi = \{\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots\}$, entonces el paquete de ondas ϕ se puede denotar como

$$\phi = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \phi_i. \quad (2.44)$$

Ahora dependerá escoger al conjunto Φ para analizar las propiedades de 2.44. Para ello, tomemos a Φ como el conjunto de ondas planas que dependan en tiempo y posición, tal que una onda plana se describe como

$$\phi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (2.45)$$

donde $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ se denomina el número de onda y $\omega = \frac{2\pi}{T}$ es la frecuencia.

Un paquete de ondas puede verse como una expansión de Fourier sobre una base de funciones. Las soluciones forman una base en el espacio de soluciones. En la literatura, muchas simulaciones de paquetes de ondas se forman utilizando ondas planas o funciones gaussianas [34][50].

2.5.2 El paquete de ondas gaussiano

Al construir un paquete de ondas para sistemas cuánticos, se busca un estado inicial que permita obtener información relacionada al sistema. Por conveniencia se busca tener un estado inicial gaussiano y tal paquete de ondas se le conoce como paquete de ondas gaussiano.

El paquete de ondas gaussiano se puede construir tomando como base a las funciones de onda plana.

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)},$$

donde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. Entonces podemos generar la expansión de Fourier con ondas planas como sigue

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(\mathbf{x}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} d^3x. \quad (2.46)$$

Los distintos valores $a(k)$ corresponden a los coeficientes de Fourier que relacionan las funciones base, u ondas planas, con el estado inicial gaussiano $\Psi(\mathbf{x}, 0)$, es decir

$$\Psi(\mathbf{x}, 0) = e^{-(k-k_0)^2/2\sigma^2}$$

y entonces el coeficiente $a(k)$ queda determinado como

$$a(x) = \int e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} e^{-(k-k_0)^2/2\sigma^2} dt$$

La ecuación (2.46), además nos permite obtener otro tipo de relaciones. Si ω es función de \mathbf{k} , entonces $\omega(\mathbf{k})$ se denomina la *relación de dispersión*. La relación de dispersión es la clave para obtener las propiedades físicas de los paquetes de ondas como son la velocidad de fase y la velocidad de grupo.

La velocidad de fase se determina por

$$\mathbf{v}_p \equiv \frac{\mathbf{k}\omega}{k^2} \quad (2.47)$$

y la velocidad de grupo se define como

$$\mathbf{v}_g \equiv \nabla_k \omega \quad (2.48)$$

Si consideramos el caso de una dimensión, entonces tenemos que la expansión de Fourier se expresa como

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(x) e^{i(kx - \omega t)} dx. \quad (2.49)$$

con velocidad de fase $v_p = \omega/k$ y velocidad de grupo $v_g = d\omega/dk$.

2.5.3 Paquetes de onda en mecánica cuántica

Las funciones de onda son soluciones a las ecuaciones diferenciales de Schrödinger o Dirac. Dichas ecuaciones se representan en términos de Hamiltonianos. Considerando que se tienen las relaciones

$$Hu_n = E_n u_n, \quad Hu_k = E(k) u_k$$

para los estados ligados y continuos respectivamente, donde E_n es un elemento del espectro continuo y u_n la solución asociada a ese valor de energía. Similarmente, los valores $E(k)$, son elementos de un rango continuo de energía y u_k la solución propia correspondiente a ese nivel de energía. Una forma general para expresar un paquete de onda, que incluye a las regiones de energía donde se tiene un espectro continuo y donde se tiene un espectro discreto, es como se presenta en el artículo clásico de Goldberg, Schey y Schwartz. [13]:

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t} u_n(x) + \int_{\mathbb{E}} a(k) e^{-iE(k)t} u_k(x) dk \quad (2.50)$$

donde los coeficientes a_n y $a(k)$ están definidos como

$$\begin{aligned} a_n &= \langle u_n, \psi(x, 0) \rangle \\ a(k) &= \langle u(k), \psi(x, 0) \rangle, \end{aligned}$$

y $\psi(x, 0)$ es el estado inicial del sistema.

Por conveniencia, podemos elegir el estado inicial $\psi(x, 0)$ como el Gaussiano, que sólo depende de la posición:

$$\psi(x, 0) = e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} e^{-ik_0 x}, \quad (2.51)$$

donde σ representa la desviación estandar de x , y k_0 representa el promedio del momento. En este estado inicial, el promedio del número de onda es k_0 , es decir $\langle k \rangle = k_0$, con varianza $\langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle = \sigma_k$. Es fácil ver que la frecuencia del paquete de ondas es

$\omega = k_0$ y que el número de onda K sería $-i/2\sigma^2$ o bien $-i\sigma/2$, por la relación de incertidumbre que establece $\sigma\sigma_k = 1$. De esta forma se espera que la velocidad de fase sea $\omega/k = 2\sigma^2k_0$ y la velocidad de grupo sea

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dx} \langle \psi(x, 0), k\psi(x, 0) \rangle.$$

Para el caso de la ecuación de Dirac, la ecuación (2.50) puede extenderse para incluir explícitamente a las dos funciones que incluye el espinor solución. De esta forma, el paquete de onda, para el caso relativista, puede escribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & \sum_n a_{n,1} e^{-iE_n t} u_{n,1}(x) + \sum_n a_{n,2} e^{-iE_n t} u_{n,2}(x) \\ & + \int a_1(k) e^{-iE(k)t} u_{k,1}(x) dk + \int a_2(k) e^{-iE(k)t} u_{k,2}(x) dk \end{aligned} \quad (2.52)$$

En esta ecuación, las funciones $u_{n,1}(x)$ y $u_{n,2}(x)$ representan las dos funciones componentes del espinor correspondiente al n -ésimo valor del espectro discreto de energía. Y, de manera análoga, las funciones $u_{k,1}(x)$ y $u_{k,2}(x)$ corresponden a los componentes del espinor cuando k recorre los valores continuos del espectro.

El estado inicial $\Psi(x, 0)$ ahora es un espinor, y puede definirse de manera análoga a (2.51)

$$\Psi(x, 0) = e^{-(x-x_0)/2\sigma^2} e^{-ik_0 x} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1(x, 0) \\ \psi_2(x, 0) \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

De esta manera, los valores $a_{n,1}$, $a_{n,2}$, $a_1(k)$ y $a_2(k)$ de (2.52) se expresan como

$$\begin{aligned} a_{n,1} &= \langle u_{n,1}(x), \psi_1(x, 0) \rangle \\ a_{n,2} &= \langle u_{n,2}(x), \psi_1(x, 0) \rangle \\ a_1(k) &= \langle u_{k,1}(x), \psi_2(x, 0) \rangle \\ a_2(k) &= \langle u_{k,2}(x), \psi_2(x, 0) \rangle \end{aligned}$$

Las soluciones que se obtienen a partir de un paquete de onda se denominan soluciones de estados de energía mixtos, ya que involucran la superposición de soluciones correspondientes a estados de energía puros.

Como $|\psi(x, t)|^2$ se interpreta como la densidad de probabilidad, el paquete de onda debe cumplir que la probabilidad de encontrar a la partícula en el espacio sea 1, es decir

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

Para que el paquete de onda cumpla esta propiedad debemos normalizarlo dividiendo a ψ entre su norma

$$\Psi = \frac{\psi}{\|\psi\|}$$

Así, la norma de ψ , para el caso no relativista es

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

y en el caso relativista, la norma de un espinor ψ queda como

$$\|\psi(t)\| = \left(\int_{\mathbb{R}} (\|\psi_1(x, t)\|^2 + \|\psi_2(x, t)\|^2) dx \right)^{1/2}$$

Afortunadamente, las funciones de onda dependientes del tiempo, tienen la propiedad de la conservación de la norma, lo que nos indica que sólo habrá que calcularla una vez en la simulación.

2.5.4 El espectro

El desarrollo de las herramientas matemáticas para dar soporte a la mecánica cuántica ha dejado de manifiesto que el problema de cuantización puede plantearse como un problema de valores propios, donde se busca obtener la solución al hamiltoniano que representa al sistema físico

$$H\psi(\mathbf{x}) = \lambda\psi(\mathbf{x}).$$

donde el conjunto de todos los valores propios λ forman el espectro del sistema. El operador H puede ser un operador diferencial de Schrödinger o Dirac, por lo que esta expresión presenta la forma general de escribir cualquier sistema cuántico. Sin embargo, las ecuaciones diferenciales pueden reemplazarse por operadores que actúan sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} y las condiciones a la frontera se sustituyen por la selección de un dominio [51]. La cuantización está implícita en la hermiticidad del hamiltoniano. Para que el hamiltoniano tenga esta propiedad, debe ser "hipermaximal" [12], lo cual llega a ser una característica de los potenciales singulares y que a la postre, puedan ser tratados con la teoría de Weyl.

El espectro de un operador H se define por la no existencia del resolvente $(H - \lambda I)^{-1}$. Es fácil notar que para matrices finitas la inversa simplemente puede no existir. Otra posibilidad es que el resolvente sea no acotado. La primera situación define el espectro discreto, pero la segunda posibilidad genera un espectro continuo.

Las ecuaciones de Schrödinger y Dirac pueden entonces tener asociados espectros discretos y continuos o una combinación de ambos, que denominaremos espectros mezclados. En general, por un lado, si un sistema físico cuenta con un espectro discreto, entonces contiene estados ligados asociados a cada elemento del espectro. Por otro lado, si el sistema tiene un espectro continuo, se establece que los estados no están ligados.

2.6 Simulación

Desde el artículo clásico de Goldberg, Schey y Schwartz[13]² se han generado una gran cantidad de trabajos orientados a la simulación de paquetes de onda. Hay dos enfoques principales para construir los paquetes de ondas [13][52]. Un enfoque es haciendo la integración numérica de la ecuación de onda de Schrödinger o Dirac respecto al tiempo. Ambos casos se pueden representar en términos del hamiltoniano

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = H\Psi(\mathbf{x}, t),$$

y se pueden resolver numéricamente utilizando algoritmos de integración como WKB.

El otro enfoque consiste en formar el paquete de ondas como una superposición de soluciones estacionarias a las ecuaciones de onda. Esta solución típicamente utiliza un enfoque de sumas e integrales de Riemann. La ventaja de este enfoque es que permite utilizar mucha de la maquinaria de series de Fourier para formar y estudiar el paquete de ondas. Bajo este enfoque las soluciones estacionarias pueden ser referentes a la posición o al momento.

Si originalmente se tiene la formación del paquete de ondas como una expansión de Fourier de funciones relacionadas con la posición, al aplicar la transformación de Fourier a la serie, se permite hacer la expansión en términos de las soluciones del momento. Así, la transformación de Fourier relaciona a las soluciones espaciales con las de momento. Sea $\psi(x)$ una función representada por una expansión de Fourier, y sea $\widehat{\psi}(x)$ la transformación de Fourier aplicada a la función $\psi(x)$, entonces el teorema de Fourier-Plancherel:

$$\int_{\mathcal{R}^n} |\psi(x)|^2 d^n x = \int_{\mathcal{R}^n} |\widehat{\psi}(x)|^2 d^n x \quad (2.54)$$

establece que el paquete de ondas es equivalente con la expansión en términos de funciones solución relacionadas a la posición o al momento.

2.6.1 Paquetes de ondas no relativistas

Para los casos de sistemas con espectros discretos de Schrödinger, la simulación no representa problema, ya que se conoce el espectro y el conjunto de soluciones propias asociadas. Y en caso de que no se tengan los valores propios o soluciones propias de manera explícita se pueden obtener numéricamente con métodos para el *problema de valores dos puntos en la frontera*[53][54]. Por lo que una suma de Riemann bien puede realizar la superposición de los estados. Sin embargo, muchos de los trabajos en simulación de paquetes de onda no relativistas versan en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, utilizando métodos de integración como el WKB. Sin embargo, aún en estos casos se deben tomar en consideración los rangos en que se trabajarán los espectros del sistema.

²Este trabajo se considera como uno de los artículos más representativos en los 60 años del *American Journal of Physics*.

Sin embargo, se sabe que la forma diferencial de la ecuación de Schrödinger, es del tipo de operador diferencial de Sturm-Liouville. Al respecto se han realizado una gran cantidad de trabajos para obtener soluciones numéricas, tanto para las aproximaciones del espectro como para las aproximaciones de las funciones solución, ejemplo de estos trabajos se pueden encontrar en [14][30][32].

2.6.2 Simulación de paquetes de onda relativistas

Contrario al trabajo desarrollado hecho con la ecuación de Schrödinger, la simulación de paquetes de ondas para sistemas descritos con la ecuación de Dirac no ha tenido mucho avance. Posiblemente la escasez de simulaciones para esta área se deba a que aún no es clara la manera de interpretar las soluciones a dicha ecuación, ni la forma de plantear los operadores de las observables, ni las implicaciones físicas que se dan por los efectos relativistas. Acaso algunos trabajos sobre paquetes de onda relativistas han aparecido desde finales de la década de 1990, como el de Nitta y Kudo [52], o el de Thaller [50][35].

La dinámica de paquetes de onda para partículas cargadas en campos electromagnéticos se han investigado numéricamente usando las ecuaciones de Dirac o de Klein Gordon. Existen algunos experimentos numéricos sobre el estudio de paquetes de onda relativistas para el caso de partícula libre con altas intensidades de laser [55][56][57]. Estos experimentos se modelan a partir del estudio de soluciones analíticas sobre la dinámica de paquetes de onda relativistas, y usan como base a la ecuación de Klein Gordon [58] y hacen la superposición de estados de Volkov [59]. Sin embargo, con este enfoque no se obtienen los efectos de spin.

Algunos experimentos numéricos para obtener soluciones a la ecuación de Dirac utilizan el método de división de operador. Este método consiste en obtener las soluciones a la ecuación de Dirac dependiente del tiempo [57].

Referente a la teoría de Sturm-Liouville y la ecuación de Dirac, se ha hecho un gran trabajo tratando de extender el problema singular de Sturm-Liouville a los operadores de Dirac, para tratar de conciliar muchos resultados de la teoría de Weyl con los sistemas cuánticos relativistas, ejemplo de ello es el trabajo de Levitan y Sargsjan [27] y de Sakhnovic [28].

2.6.3 El espectro

Se han mencionado los diferentes mecanismos para construir un paquete de onda. Particularmente un enfoque de interés es el relacionado a la suma de Riemann, donde se deben hacer las computaciones para obtener el espectro y las soluciones base, ya que el estudio del espectro y otros elementos involucrados en el paquete de onda (como los coeficientes de Fourier) nos pueden ayudar a dar una mejor interpretación de las simulaciones. Sin embargo, el punto delicado en este enfoque es el manejo del espectro. Como se ha comentado, podemos asociar tres tipos de espectro a las ecuaciones de Schrödinger y Dirac: discreto, continuo y mixto.

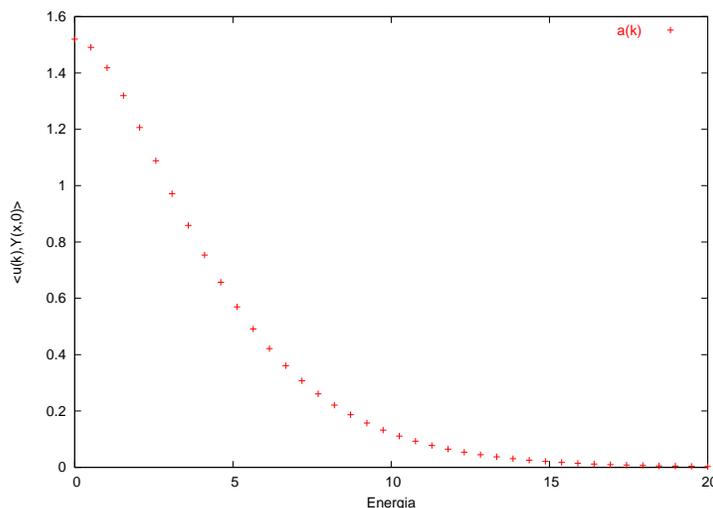


Figura 2.1: Coeficientes de Fourier para la partícula libre no relativista.

El espectro discreto

El espectro discreto se puede obtener con los métodos de *problema de valores dos puntos en la frontera* [53][54] o los desarrollados explícitamente para los operadores de Sturm-Liouville [14],[16]. Básicamente los métodos numéricos que se utilizan son el de disparo o el método de Prüfer, o algunos resultados de la teoría regular y singular de Sturm-Liouville. Brevemente, la idea del método de disparo consiste en ir variando los valores de energía, de una posible solución, hasta que el valor en la frontera se aproxime lo suficiente a la condición impuesta; los valores de energía que tengan una buena aproximación se incluyen en el conjunto de valores de energía válidos para el sistema. Por otro lado, el método de Prüfer consiste en ir recorriendo los valores de energía y ver el comportamiento asintótico de la solución, y donde existan variaciones de este valor asintótico es donde se determina la existencia de un elemento del espectro discreto.

El espectro continuo

El espectro continuo, se puede obtener de manera analítica, o utilizando alguno de los métodos mencionados anteriormente, pero verificando que no se trata de una región densa de elementos del espectro continuo, como se ha planteado para el caso del monopolo magnético. En ambos casos, podemos tener la existencia de una infinidad de valores de energía que pertenezcan al espectro, y que los límites de su intervalo sean finitos o infinitos. Sin embargo, podemos utilizar los coeficientes de Fourier $a_n, a(k)$

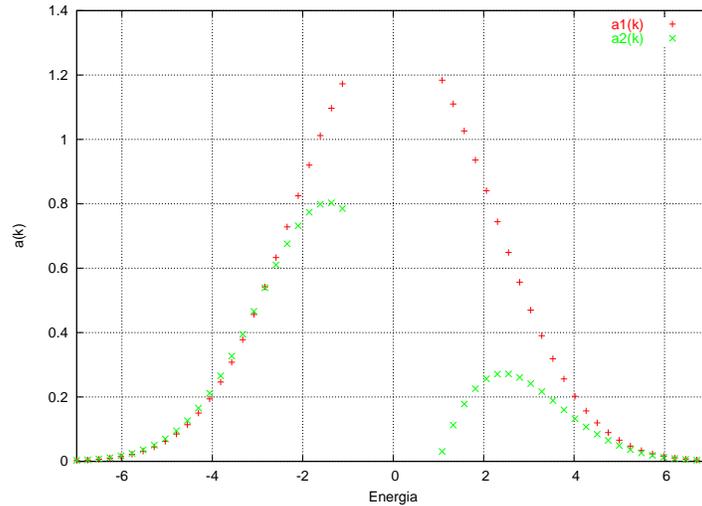


Figura 2.2: Coeficientes a_k para la partícula libre relativista

para tener una referencia del grado de participación de las soluciones u_n y $u(k)$ en la formación del paquete de onda. De esta manera, podemos definir si es necesario utilizar todo el rango del espectro, o solo una parte.

Por ejemplo, se sabe que el espectro de la partícula libre de Schrödinger es

$$\mathbb{E} = \{E \mid E > 0, \}$$

y en el caso de la partícula de Dirac, el espectro es

$$\mathbb{E} = \{E \mid E < -m_0 \text{ ó } E > m_0\}.$$

En ambos casos se tiene un sistema con un espectro continuo y con rango infinito. La figura 2.1 muestra los valores de los coeficientes de Fourier $a_k(x) = \langle u_k(x), \psi(x, 0) \rangle$ para el caso no relativista, y donde el estado inicial se toma como el definido en la ecuación (2.51) con la desviación estandar $\sigma = 1$ y el promedio del momento $k_0 = 1$. Se puede apreciar en la figura 2.1 que después del valor 20, aproximadamente, el valor de los coeficientes es muy cercano a cero, y por ende, se pueden desechar a partir de este valor de energía. Con lo que se reduce el espectro del rango $[0, \infty)$ al rango $[0, 20)$.

El mismo criterio se utiliza para el caso de Dirac. Consideremos ahora el valor de la masa en reposo $m_0 = 1$, y el estado inicial, ecuación (2.53), con los valores para $\sigma = 1/\sqrt{\pi}$ y $k_0 = 0.2$. La figura 2.2 presenta los coeficientes de Fourier para el caso de la partícula libre relativista. Podemos apreciar que podemos cambiar los rangos de energía asociados al espectro de la partícula libre relativista de los rangos $(-\infty, -1]$ y

$[1, \infty)$ a los rangos $(-7, -1]$ y $[1, 7)$ respectivamente. Por otro lado, el valor del promedio del momento k_0 , repercute directamente en el grado de participación del segundo elemento del espinor: $\psi_2(x)$ de la solución, si el valor $k_0 = 0$ los coeficientes de Fourier asociados al segundo elemento del espinor son cero, lo que indica que los valores del primer elemento del espinor son los únicos que contribuyen en la construcción del paquete de onda.

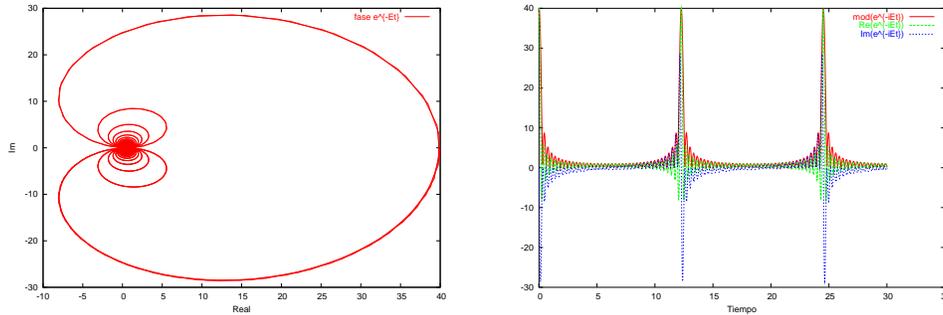


Figura 2.3: Comportamiento de la parte temporal en un paquete de ondas.

Evolución en el tiempo Una característica de las funciones de onda dependientes del tiempo, es que pueden descomponerse en una parte estática y una dependiente del tiempo, como se aprecia en la ecuación (2.30). Al hacer la discretización de la integral que representa la superposición de soluciones para el espectro continuo, uno se puede preguntar que ocurre con el componente del tiempo incluido en el paquete de onda.

Consideremos únicamente la parte de la discretización que incluye a la componente del tiempo, entonces tenemos la expresión

$$\sum_{k=1}^N e^{-iE_k t}, \quad (2.55)$$

donde N es el número de elementos que constituyen la partición que está discretizando un rango del espectro continuo. Esta expresión genera la evolución del paquete de ondas. Un comportamiento dinámico que se puede obtener es la existencia ciclos en la evolución del paquete de ondas. Es decir saber si hay un tiempo t_c tal que $\Psi(x, t) = \Psi(x, t + t_c)$. Para verificar esto, podemos revisar el comportamiento de la expresión compleja (2.55) en gráficas edn en el plano complejo y del valor absoluto de (2.55) respecto al tiempo, tal y como se muestra en la figura (2.3). Como se puede ver en la gráfica (2.3) la expresión (2.55) genera ciclos, estos ciclos están determinados por la longitud del espectro continuo que se considera y la partición.

La aparición de ciclos en la evolución de un paquete de ondas donde se discretiza el espectro continuo, depende del número de elementos que tenga la partición y de la

longitud del rango de energía que se considere. La gráfica (2.4) muestra la aparición de

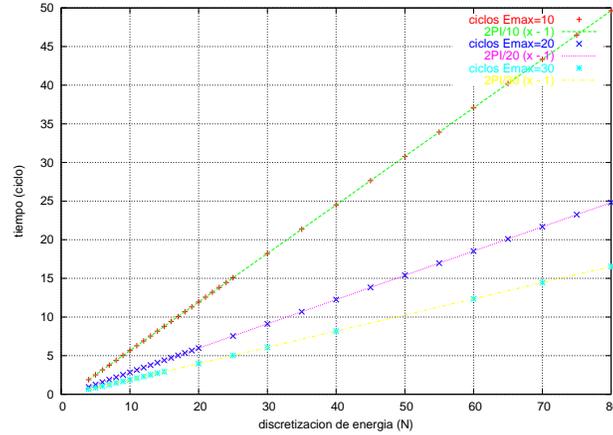


Figura 2.4: Aparición de ciclos para distintas longitudes de espectro y número de particiones

ciclos para distintas longitudes del rango de espectro continuo y para diferentes particiones. Afortunadamente, no es difícil encontrar esta relación, y podemos establecer que la aparición de ciclos ocurre cada t_c unidades de tiempo donde

$$t_c = \frac{2\pi}{L_{\mathbb{E}}}(N - 1), \quad (2.56)$$

donde $L_{\mathbb{E}}$ es la longitud del rango que se considera, y N es el número de elementos de la partición del rango. Esta fórmula también es válida para el caso de varias regiones de espectro continuos, donde L es la suma de la longitud de cada región.

El espectro mixto

El caso del espectro mixto presenta mas problemas, pues la única forma de conocer su tipo es de manera analítica para conocer exactamente cuales son los límites donde es continuo y donde es discreto.

Se han desarrollado trabajos para identificar el tipo de espectro, pero desde el enfoque de problema inverso, donde se tiene la información del espectro y a partir de este punto, se busca conocer la forma del operador de Sturm-Liouville o del operador de Dirac. Una excelente discusión sobre la relación del espectro con las condiciones en la frontera de los operadores de Sturm-Liouville se puede encontrar en [60].

2.6.4 El enfoque de integral de Stieltjes

La construcción de paquetes de onda, como la hemos desarrollado, debe manejar por separado a las regiones de energía con espectro discreto y con espectro continuo. La discretización de regiones del espectro continuo induce un fenómeno de aparición de ciclos, pero no es parte del sistema cuántico. Por otro lado, la granularidad de la partición demandará mayor uso de memoria al mantener las soluciones estacionaras guardadas en memoria, lo cual si no se cuida, puede generar problemas de desborde de memoria, o alentamiento del sistema si se hace un uso excesivo de intercambio de páginas de memoria con el disco duro. Por otro lado, la generación de soluciones con problemas a la frontera que sean la base de soluciones puede realizarse utilizando métodos conocidos como el de disparo o por diferencias finitas.

Una forma de ahorrarnos muchos problemas computacionales, es utilizar el enfoque del problema singular de Sturm-Liouville, y resolver el paquete de onda, utilizando una integral de Stieltjes. Evidentemente en este enfoque el problema computacional, radica en encontrar la función espectral, pero al final vale la pena, ya que la generación de soluciones fundamentales queda reducido a una evaluación de los límites de las función espectral [12][18] [17] [19] [44].

2.7 Conclusiones

Se sabe que los sistemas cuánticos no relativistas y relativistas se describen por medio de las ecuaciones de onda de Schrödinger y Dirac, respectivamente. Por motivos de interpretación, a estas ecuaciones de onda se les asocia un espacio de Hilbert \mathcal{H} de funciones y espinores cuadráticamente integrables al cual deben pertenecer las soluciones.

Obtener soluciones a las ecuaciones de la mecánica cuántica requiere de métodos de aproximación numérica debido a que por la restricción de que las soluciones pertenescan a un espacio de Hilbert, muchos sistemas cuánticos no son solubles desde el punto de vista analítico. Una forma conveniente de obtener soluciones que sean cuadráticamente integrables es contruyendo un paquete de ondas. Un punto interesante en el estudio de paquetes de ondas es el hecho de que, si bien el paquete de ondas pertenece al conjunto de funciones cuadráticamente integrables, la base de funciones con la que se forma el paquete de ondas, no necesariamente está incluida espacio de Hilbert \mathcal{H} asociado a la ecuación diferencial. Esto se debe a que la base de funciones se encuentra en un espacio más general: el espacio de Banach.

Desde los primeros trabajos de simulación de paquetes de onda, se optó por resolver las ecuaciones de onda respecto al tiempo, a pesar de que en teoría, es posible formar el paquete de ondas a partir de soluciones estacionarias. La principal dificultad en este último procedimiento radica en encontrar la base de soluciones y obtener y manejar el espectro del sistema. Hemos presentado un experimento del efecto de la discretización del espectro y hemos observado que la partición realizada al rango de energías que se toma en un espectro continuo para su manejo numérico tiene una repercusión directa

sobre la evolución del paquete de onda ya que se presenta la aparición de ciclos. Estos ciclos son generados por la discretización que se utiliza en los métodos numéricos.

Sin embargo, es deseable utilizar el método de construcción del paquete de ondas por superposición de estados estacionarios debido a que permite obtener un mejor entendimiento del comportamiento del sistema, porque además se obtiene información extra relativa al espectro; situación que no ocurre si se utiliza el método de integración para la temporal. El espectro continuo presenta algunos comportamientos interesantes en el operador hamiltoniano y sus soluciones. La asociación del espectro continuo, con los operadores hipemaximales y que a la vez se refleja en potenciales singulares, hace deseable que las ecuaciones de la mecánica cuántica se trabajen con ayuda de la teoría singular de Sturm-Liouville, o teoría de Weyl, ya que da un soporte matemático al operador diferencial de Schrödinger.

Capítulo 3

Transformación de Möbius e integral de Stieltjes

La construcción de paquetes de ondas utilizando la teoría de Weyl se basa en el uso de la función m de Weyl-Titchmarsh. Para entender el comportamiento de los resultados que se obtienen a partir de ésta función, se debe tratar, en principio, como una transformación de Möbius en la evaluación en un punto de las soluciones que forman a la función m . El paquete de ondas se puede construir con referencia a una función de peso, que es la función de densidad espectral. La función de densidad espectral se obtiene de la parte imaginaria de la función m de Weyl-Titchmarsh. Construir el paquete de onda haciendo una integración respecto a la función de densidad espectral es resolver una integral de Stieltjes, donde la función de densidad espectral es la función integradora. En este capítulo se discute y se dan algunos resultados que obtuvimos sobre la transformación de Möbius y la integral de Stieltjes. La presentación de estos temas tiene una orientación hacia la resolución de la función m y del paquete de ondas, respectivamente.

3.1 Transformación de Möbius

La transformación de Möbius es un mapeo conforme sobre el plano complejo. A pesar de su aparente simplicidad, la transformación de Möbius es la parte central de diversas áreas de investigación en matemáticas modernas. Esto se debe a la conexión que establece entre el plano complejo y espacios con geometrías no euclidianas [61]. Esta transformación tiene uso en varias teorías de física, como la teoría general de la relatividad, ya que la transformación de Möbius en el plano complejo corresponde con los mapeos complejos de las transformaciones de Lorentz [62]. Y como veremos a lo largo de este documento, el comportamiento geométrico de la transformación de Möbius establece el comportamiento de soluciones con condiciones a la frontera de la ecuación de Schrödinger para mecánica cuántica.

Esta transformación ha sido muy discutida en libros clásicos de análisis complejo como Ahlfors [63]. Algunos autores que dan una orientación a las propiedades geométricas de las funciones complejas dedican una amplia parte del estudio a la transformación de Möbius [64], y recientemente se ha buscado tener un estudio analítico y geométrico desde un enfoque computacional de las funciones complejas, pero haciendo incapié en Möbius, por ejemplo [61][65] y [37].

Se sabe que esta transformación posee algunas propiedades geométricas como la de mapear círculos en círculos y que hay propiedades de su mapeo que permiten clasificarla en elíptica, hiperbólica, hiperbólica impropia, loxodrómica y parabólica. La transformación de Möbius presenta distintos comportamientos geométricos y analíticos. Con ayuda de la aplicación *VComplex*¹ hemos obtenido algunas representaciones gráficas de esta transformación. Este análisis nos ayudará a entender el comportamiento geométrico y analítico de la función m de Weyl-Titchmarsh, su relación con sus condiciones en la frontera y con el problema de valores propios para formar la función de densidad espectral.

Los casos especiales de la transformación de Möbius dependen del valor que tomen las constantes complejas asociadas. Los valores equivalentes de estas constantes son las condiciones en la frontera de la función m de Weyl-Titchmarsh. Sin embargo, en este punto se debe tener cuidado, ya que en la función m , estas constantes se presentan como funciones del valor propio del operador de Sturm-Liouville asociado.

Es conocido que la representación matricial de la transformación de Möbius no representa una transformación de \mathbb{R}^2 o \mathbb{C}^2 [37][64][66]. Los vectores resultantes son componentes de un cociente que forman al número complejo resultante y, similarmente, los vectores aplicados son el cociente del número complejo al que se le aplica. Sin embargo, al trabajar las soluciones para la ecuación de Dirac en una dimensión espacial, soluciones de la forma $\chi = \varphi + m\psi$, resulta que los elementos χ , φ y ψ son vectores de funciones, por lo que ¿la forma de m debe ser matricial?, ¿esta matriz debe tener propiedades “similares” a la representación matricial conocida de la función de Möbius? Diferentes autores han realizado extensiones matriciales a la función de Möbius [27][28]; estas extensiones conservan algunos de los comportamientos que muestra la transformación de Möbius.

Una transformación de Möbius es un mapeo de la forma

$$\mathcal{M}(z) = \frac{az + b}{cz + d} \quad (3.1)$$

donde a, b, c y d son constantes complejas.

La forma matricial

Si se tiene la relación

$$Dwz + Cw + Bz + A = 0$$

¹Aplicación de visualización de funciones y transformaciones complejas desarrollada en STP-DIAS, Irlanda, y CINVESTAV-IPN para este trabajo de investigación.

entonces si se despejan en un caso w y en otro z tenemos:

$$w = -\frac{Bz + A}{Dz + C} \quad (3.2)$$

$$z = -\frac{Cw + A}{Dw + C} \quad (3.3)$$

Estas transformaciones lineales fraccionales se pueden representar matricialmente, tomando la representación de cocientes de w y z . Si tenemos $w = s/t$ y $z = u/v$, entonces obtenemos la representación matricial

$$\begin{pmatrix} s \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -B & -A \\ D & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

Esto se verifica fácilmente al obtener el valor de s, t y $w = s/t$:

$$\begin{aligned} s &= -(Bu + Av) \\ t &= Du + Cv \\ \frac{s}{t} &= -\frac{Bu + Av}{Du + Cv} = \frac{B\frac{u}{v} + A}{D\frac{u}{v} + C} = -\frac{Bz + A}{Dz + C} = w \end{aligned}$$

Si cambiamos las variables $a = -B, b = -A, c = D$ y $d = C$ podemos obtener una presentación matricial más clara. Es decir, sea la matriz M , definida por

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

la matriz que representa a una transformación de Möbius en el plano complejo. Se dice que la transformación de Möbius es normalizada si $(ad - bc) = 1$, es decir, cuando el determinante de M es 1. Es fácil normalizar M siempre que $|M| \neq 0$, sea M_N la matriz normalizada de M :

$$M_N = \frac{M}{|M|}.$$

Además es bien conocida la forma de una matriz inversa 2×2

$$M^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}.$$

Note que $\mathbf{1}$ es la matriz unitaria 2×2 y que hemos hecho el cambio de variables tales que $a = -B, b = -A, c = D$ y $d = C$. La inversa M^{-1} se puede obtener siempre que $ad - bc \neq 0$ y entonces se dice que la transformación es uno a uno y, si la transformación es normalizada, la transformación inversa es:

$$M^{-1}(z) = \frac{dz - b}{-cz + a}.$$

La composición de transformaciones de Möbius representada por matrices cumple con la multiplicación, suponga que se tienen dos transformaciones de Möbius M_1 y M_2 , donde

$$M_1 = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix}, \quad M_2 = \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix}$$

Entonces la multiplicación de las matrices representa la composición de dos transformaciones de Möbius.

$$M_1 M_2 = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 a_2 + b_1 c_2 & a_1 b_2 + b_1 d_2 \\ c_1 a_2 + d_1 c_2 & c_1 b_2 + d_1 d_2 \end{pmatrix}$$

Esto se verifica fácilmente, sea \mathcal{M}_1 la transformación correspondiente a la matriz M_1 , y \mathcal{M}_2 la transformación correspondiente a la matriz M_2 , entonces:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_1(\mathcal{M}_2) &= \frac{a_1 \frac{a_2 z + b_2}{c_2 z + d_2} + b_1}{c_1 \frac{a_2 z + b_2}{c_2 z + d_2} + d_1} \\ \Rightarrow \mathcal{M}_1(\mathcal{M}_2) &= \frac{(a_1 a_2 + b_1 c_2)z + (a_1 b_2 + b_1 d_2)}{(c_1 a_2 + d_1 c_2)z + (c_1 b_2 + d_1 d_2)} \end{aligned}$$

3.1.1 Descomposición de la transformación de Möbius

El mapeo carece de interés cuando las constantes cumplen con $(ad - cb) = 0$, y si $c \neq 0$, ya que la transformación mapea todos los valores de z al punto a/c . Esto se debe a que

$$\begin{aligned} \frac{az + b}{cz + d} &= \frac{a}{c} \\ \Rightarrow c(az + b) &= a(cz + d) \\ \Rightarrow caz + cb &= acz + ad \\ \Rightarrow cb &= ad \\ \Rightarrow ad - cb &= 0 \end{aligned} \tag{3.4}$$

a este caso se le conoce como caso singular —el nombre tiene que ver principalmente a que (3.4) representa el caso del determinante cero, cuando se expresa a la transformación de Möbius en forma matricial con lo que implica la no existencia de la matriz inversa—.

Es conocido que, si $c \neq 0$, la transformación de Möbius puede descomponerse en la siguiente serie de transformaciones [63][61].

$$T_1(z) = z + \frac{d}{c} \tag{3.5}$$

$$T_2(z) = \frac{1}{z} \tag{3.6}$$

$$T_3(z) = -\frac{(ad - bc)}{c^2} z \tag{3.7}$$

$$T_4(z) = z + \frac{a}{c} \tag{3.8}$$

$\mathcal{M}(z)$	$\mathcal{M}(z) = 0$	$\mathcal{M}(z) = \infty$	$\mathcal{M}(z) = z$	$\lim_{z \rightarrow \infty} \mathcal{M}(z)$
$\frac{az}{d}$	$z = 0$	$z = \infty$	$z = 0, z = \infty$	∞
$\frac{b}{cz}$	$z = \infty$	$z = 0$	$z = \pm \sqrt{\frac{b}{c}}$	0
$\frac{az+b}{d}$	$z = -\frac{b}{a}$	$z = \infty$	$z = \frac{b}{d-a}$	∞
$\frac{az+b}{cz}$	$z = -\frac{b}{a}$	$z = 0$	$z = \frac{a \pm \sqrt{a^2 + 4bc}}{2c}$	$\frac{a}{c}$
$\frac{az}{cz+d}$	$z = 0$	$z = -\frac{d}{c}$	$z = \frac{(a-d) \pm \sqrt{(d-a)^2 - 4c}}{2c}$	$\frac{a}{c}$
$\frac{b}{cz+d}$	$z = \infty$	$z = -\frac{d}{c}$	$z = \frac{-d \pm \sqrt{d^2 + 4bc}}{2c}$	0
$\frac{az+b}{cz+d}$	$z = -\frac{b}{a}$	$z = -\frac{d}{c}$	$z = \frac{(a-d) \pm \sqrt{(d-a)^2 + 4bc}}{2c}$	$\frac{a}{c}$

Tabla 3.1: Raíces, polos, puntos fijos y valores asintóticos de las formas de la transformación de Möbius

es decir, $\mathcal{M}(z) = T_4(T_3(T_2(T_1(z))))$. Esto se verifica fácilmente:

$$\begin{aligned}
 T_4(T_3(T_2(T_1(z)))) &= -\frac{(ad-bc)}{c^2} \left(\frac{1}{z + \frac{d}{c}} \right) + \frac{a}{c} \\
 &= \frac{-(ad-bc) + a(cz+d)}{c(cz+d)} \\
 &= \frac{c(az+b)}{c(cz+d)} \\
 &= \frac{az+b}{cz+d} = \mathcal{M}(z)
 \end{aligned}$$

Se observa que la transformación (3.5) es una translación. La transformación (3.6) es la inversión. La transformación (3.7) es una multiplicación por un complejo —lo que se traduce geoméricamente en una rotación y un escalamiento—. Y finalmente, la transformación (3.8) es otra translación.

El comportamiento geométrico de cada transformación y algunas técnicas de visualización que utilizamos para observar el comportamiento de las funciones y transformaciones complejas se puede encontrar en el apéndice A.

De la literatura de análisis complejo se sabe que este mapeo es conforme, que es uno a uno, y que mapea círculos en círculos. En las siguientes secciones se presentan algunas propiedades que son de interés en funciones complejas para las transformaciones de Möbius y algunos resultados de interés de los mapeos de líneas y círculos en el plano complejo.

3.2 El círculo inversor

Por la descomposición de la transformación de Möbius en (3.5)(3.6)(3.7)(3.8) se tiene que la transformación de Möbius es un círculo inversor en alguna parte del plano complejo. Si recordamos el comportamiento de $1/z$ este es un círculo inversor de radio 1 situado en el origen. Entonces la transformación de Möbius es el resultado de aplicarle una rotación, un escalamiento y una traslación al este círculo inversor. El centro del círculo inversor se localiza en

$$C_i = \frac{a\bar{d} - b\bar{c}}{\bar{c}d - c\bar{d}}$$

y el radio está se encuentra en

$$R_c = \frac{|ad - bc|}{|cd - c\bar{d}|}.$$

3.3 Puntos de interés

Si consideramos una transformación \mathcal{M} de Möbius no singular, \mathcal{M} puede tomar distintas formas dependiendo si hacemos una o dos constantes de la transformación cero. Al ser una transformación compleja, se puede hacer un estudio de algunas propiedades de funciones complejas como los son la localización de polos, raíces, puntos fijos y valores asintóticos. La tabla (3.1) hace una relación entre las formas de Möbius y estos puntos de interés.

En el cuadro (3.1) se puede observar que, si la transformación de Möbius es no singular, la localización de la raíz se encuentra en

$$z = -\frac{b}{a}, \quad (3.9)$$

el polo se localiza en

$$z = -\frac{d}{c} \quad (3.10)$$

La mejor forma de visualizar estos puntos es con las gráficas de contornos o de fase. La figura (3.1) muestra el polo y la raíz para el caso en que

$$\mathcal{M}(z) = \frac{-z + 1}{(1 + 0.5i)z + 1} \quad (3.11)$$

De (3.9) sabemos que la raíz de la transformación de Möbius dada en (3.11), es $z = 1$. Y por, (3.10), el polo de (3.11) se localiza en $z = -0.8 + 0.4i$.

La figura (3.1.A) muestra la gráfica de contornos de la transformación de Möbius. Los colores en el rango blanco a azul, son para las distancias 0 a 1; esto es, la región dominada por el color blanco incluye a la raíz de $m(z)$. En esta misma figura, el rango de colores de verde a rojo muestra el valor absoluto de $m(z)$ en el rango 1 a infinito.

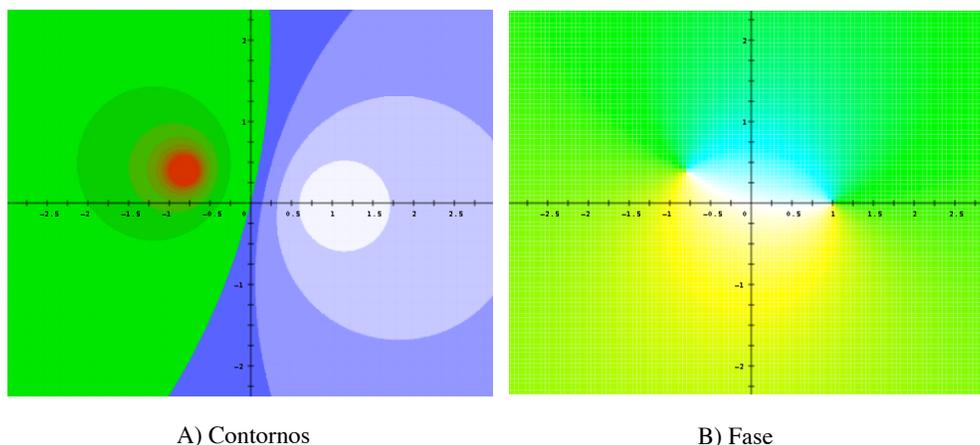


Figura 3.1: Gráficas de contorno y fase para $\mathcal{M}(z) = \frac{-z+1}{(1+0.5i)z+1}$

Así, el polo se encuentra en la región con color rojo. En la gráfica de valor absoluto es más fácil determinar la región donde se localizan estos puntos.

La figura (3.1.B) muestra la gráfica de la fase de la transformación de Möbius. Los colores en blanco presentan los números complejos cuyo argumento, resultante de la transformación, es cero, esto es, se mapean al eje real positivo del \mathcal{M} -plano. Las regiones en amarillo corresponden a los números con argumento de $\pi/2$, o los que se mapean al eje imaginario positivo. Similarmente, la región verde, que en este caso domina la mayor parte de la gráfica, indica que los números tendrán un argumento de π , es decir, se mapean a una región cercana al eje real negativo. Finalmente, la región azul corresponde a los número cuyo argumento, despues de la transformación, es $2\pi/3$, y se mapean a la región cercana al eje imaginario negativo. Note que en la gráfica de contornos es fácil localizar, con exactitud, estos puntos, pero con la ayuda de la gráfica de contornos, sabremos si corresponden al punto al infinito o, a la raíz.

El dominio de la coloración verde en la figura (3.1.B) se debe a que, el valor asintótico, de la transformación es $\frac{a}{c}$ —como se muestra en la tabla (3.1)—, es decir

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \mathcal{M}(z) = \frac{-1}{1 + 0.5i} = -0.8 + 0.4i$$

y este número está en la región cercana a la parte negativa del eje real del \mathcal{M} -plano, y la coloración de esta región es entre el color verde y amarillo.

3.4 Mapeo de semiplanos

Una característica de la transformación de Möbius es el mapeo de círculos en círculos y de líneas en círculos (se puede considerar una línea como un círculo degenerado). En base a esto es fácil deducir que el eje real e imaginario del plano complejo se mapean en círculos en el \mathcal{M} -plano. Este mapeo tiene la característica de mapear, dentro de estos círculos, la mitad del plano complejo. Esto es, la transformación de Möbius tendrá

círculos que contengan a la mitad del plano complejo o semiplano. En esta sección veremos cuales son las ecuaciones de estos círculos y cuales son las condiciones que a considerar para determinar las regiones del plano complejo se mapean dentro y fuera de estos círculos.

Podemos despejar z de (3.1) para obtener la relación

$$z = \frac{b - d\mathcal{M}}{c\mathcal{M} - a} = \frac{(b - d\mathcal{M})\overline{(c\mathcal{M} - a)}}{|c\mathcal{M} - a|^2}. \quad (3.12)$$

Si definimos los valores

$$\begin{aligned} \alpha &= \Re(a)\Re(d) + \Im(a)\Im(d) = (\overline{ad} + \overline{ad})/2 \\ \beta &= \Re(a)\Im(d) - \Im(a)\Re(d) = i(\overline{ad} - \overline{ad})/2 \\ \eta &= \Re(b)\Re(c) + \Im(b)\Im(c) = (\overline{bc} + \overline{bc})/2 \\ \kappa &= \Re(b)\Im(c) - \Im(b)\Re(c) = i(\overline{cb} - \overline{cb})/2 \\ \gamma &= \Re(c)\Re(d) + \Im(c)\Im(d) = (\overline{cd} + \overline{cd})/2 \\ \xi &= \Re(c)\Im(d) - \Im(c)\Re(d) = i(\overline{cd} - \overline{cd})/2 \\ \mu &= \Re(a)\Re(b) + \Im(a)\Im(b) = (\overline{ab} + \overline{ab})/2 \\ \nu &= \Re(a)\Im(b) - \Im(a)\Re(b) = i(\overline{ab} - \overline{ab})/2. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Entonces, podemos descomponer la representación de z de la ecuación (3.12) en su parte real e imaginaria de la siguiente forma:

$$\Im(z) = \frac{-|\mathcal{M}|^2\xi + \Re(\mathcal{M})(\kappa + \beta) + \Im(\mathcal{M})(\alpha - \eta) - \nu}{|c\mathcal{M} - a|^2} \quad (3.14)$$

$$\Re(z) = \frac{-|\mathcal{M}|^2\gamma + \Re(\mathcal{M})(\alpha + \eta) + \Im(\mathcal{M})(\kappa - \beta) - \mu}{|c\mathcal{M} - a|^2}. \quad (3.15)$$

De las expresiones (3.15) y (3.14) podemos obtener los círculos resultantes de mapear las ejes real e imaginario, respectivamente. El círculo que resulta de mapear el eje real se tiene cuando se cumple la condición $\Im(z) = 0$ y para el caso del eje imaginario la condición es $\Re(z) = 0$.

El mapeo del eje real

Veamos primero el caso del mapeo del eje real. Entonces, si se considera la condición $\Im(z) = 0$, el círculo resultante es

$$\left(\mathcal{M} - \frac{(\beta + \kappa) + i(\alpha - \eta)}{2\xi} \right) \overline{\left(\mathcal{M} - \frac{(\beta + \kappa) + i(\alpha - \eta)}{2\xi} \right)} = \left| \frac{ad - bc}{2\xi} \right|^2 \quad (3.16)$$

Es decir, el mapeo del eje real produce un círculo en el \mathcal{M} -plano con centro en

$$C_r = \frac{(\beta + \kappa) + i(\alpha - \eta)}{2\xi} \quad (3.17)$$

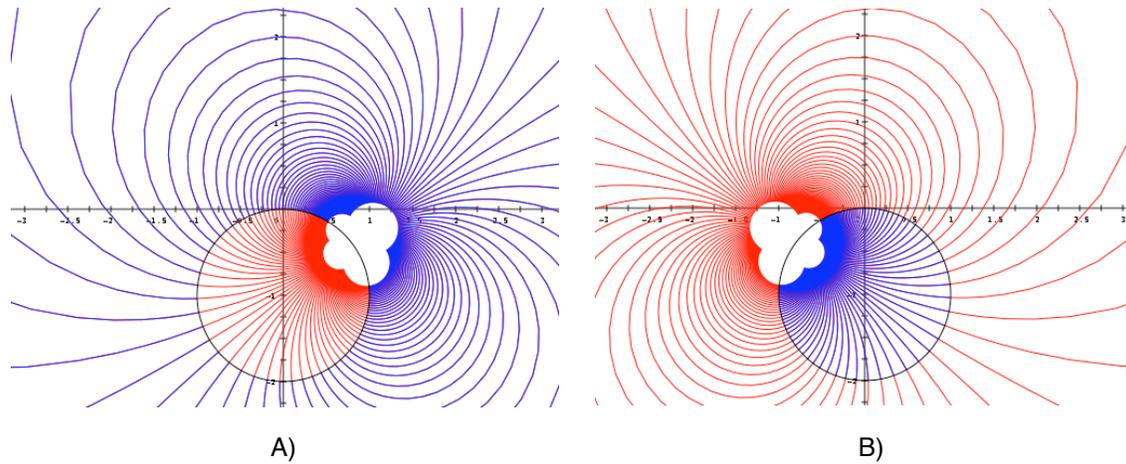


Figura 3.2: Círculo que produce el mapeo del eje real bajo una transformación de Möbius

y radio

$$R_r = \left| \frac{ad - bc}{2\xi} \right| \quad (3.18)$$

La figura 3.2 muestra un par de ejemplos del mapeo de este círculo. La figura 3.2.A corresponde a la transformación de Möbius

$$\mathcal{M} = \frac{2z + 2}{(2 + i)z + (-2 + i)}.$$

Y la figura 3.2.B corresponde a la transformación de Möbius

$$\mathcal{M} = \frac{2z + 2}{(-2 + i)z + (2 + i)}.$$

En ambos casos, los círculos quedan con centro $C_r = -i$ y radio $R_r = 1$. El mapeo del semiplano correspondiente a los números complejos con parte imaginaria negativa se representa en color azul en las figuras 3.2. La región en color rojo, representa el mapeo del semiplano complejo que corresponde a los números con la parte imaginaria positiva. Estos ejemplos muestran que el círculo resultante del mapeo del eje real es el mismo, pero contiene a uno de los dos semiplanos caracterizados por el signo de la parte imaginaria. El siguiente teorema muestra la condición de los valores de c y d para determinar el mapeo del semiplano que cae dentro del círculo 3.16.

Teorema 1 (Mapeo de semiplanos) *Sea \mathcal{M} una transformación de Möbius no singular, y sea $\xi = \Re(c)\Im(d) - \Im(c)\Re(d)$. Entonces:*

1. Si $\xi > 0$, el interior del círculo descrito por la ecuación (3.16) contiene la mitad del plano complejo que corresponde a los números cuya parte imaginaria es positiva.

2. Si $\xi < 0$, el interior círculo descrito por la ecuación (3.16) contiene la mitad del plano complejo que corresponde a los números cuya parte imaginaria es negativa.
3. Si $\xi = 0$, no existe el círculo (3.16).

Para hacer la prueba, se demuestra que la distancia del mapeo de Möbius, de los números complejos con la parte imaginaria positiva al centro del círculo (3.16), es menor que el radio R_r , asociado a este círculo, lo que indica que todos los números que cumplen con $\Im(z)$ se mapean dentro del círculo indicado en 3.16.

Prueba Supongamos $\Im(z) > 0$, entonces podemos tener la relación

$$\Im(z) > 0 \Rightarrow -|c\mathcal{M} - a|^2\Im(z) + \xi|R_r|^2 < \xi|R_r|^2$$

Sustituyendo $\Im(z)$ de (3.14) podemos obtener

$$|\mathcal{M}|^2\xi - \Re(\mathcal{M})(\beta + \kappa) - \Im(\mathcal{M})(\alpha - \eta) - \nu + \xi|R_r|^2 < \xi|R_r|^2 \quad (3.19)$$

Como $\xi > 0$ entonces tenemos

$$|\mathcal{M}|^2 - \Re(\mathcal{M})\left(\frac{\beta + \kappa}{\xi}\right) - \Im(\mathcal{M})\left(\frac{\alpha - \eta}{\xi}\right) - \frac{\nu}{\xi} + |R_r|^2 < |R_r|^2 \quad (3.20)$$

Es fácil verificar que $|C_r|^2 - |R_r|^2 = \frac{\nu}{\xi}$. Con lo que tenemos que

$$|\mathcal{M} - C_r|^2 < |R_r|^2$$

Esto es, la transformación de Möbius queda mapeada dentro del círculo (3.16), cuando $\Im(z) > 0$ y $\xi > 0$.

Si es el caso en que $\xi < 0$ entonces se tiene que la ecuación (3.19) genera

$$|\mathcal{M}|^2 - \Re(\mathcal{M})\left(\frac{\beta + \kappa}{\xi}\right) - \Im(\mathcal{M})\left(\frac{\alpha - \eta}{\xi}\right) - \frac{\nu}{\xi} + |R_r|^2 > |R_r|^2. \quad (3.21)$$

Con lo que se tiene que

$$|\mathcal{M} - C_r|^2 > |R_r|^2$$

Esto se traduce en que cuando la parte imaginaria es mayor que cero y $\xi < 0$, su mapeo queda fuera del círculo determinado por (3.16).

Ahora debemos ver los casos cuando la parte imaginaria es negativa. Entonces, procediendo de manera similar al caso positivo, obtenemos la relación

$$\Im(z) < 0 \Rightarrow -|c\mathcal{M} - a|^2\Im(z) + \xi|R_r|^2 > \xi|R_r|^2$$

lo cual puede escribirse como

$$|\mathcal{M}|^2\xi - \Re(\mathcal{M})(\beta + \kappa) - \Im(\mathcal{M})(\alpha - \eta) - \nu + \xi|R_r|^2 > \xi|R_r|^2 \quad (3.22)$$

Si consideramos que $\xi > 0$ entonces (3.22) queda como

$$|\mathcal{M}|^2 - \Re(\mathcal{M}) \left(\frac{\beta + \kappa}{\xi} \right) - \Im(\mathcal{M}) \left(\frac{\alpha - \eta}{\xi} \right) - \frac{\nu}{\xi} + |R_r|^2 > |R_r|^2. \quad (3.23)$$

Con lo que tenemos que la distancia entre el mapeo resultante de Möbius y el centro del círculo (3.16) es menor que el radio R_R .

$$|\mathcal{M} - C_r|^2 > |R_r|^2.$$

Lo que indica que los números complejos con la parte imaginaria negativa se mapean fuera del círculo (3.16) cuando $\xi > 0$.

Finalmente, si consideramos $\xi < 0$, entonces (3.22) queda como

$$|\mathcal{M}|^2 - \Re(\mathcal{M}) \left(\frac{\beta + \kappa}{\xi} \right) - \Im(\mathcal{M}) \left(\frac{\alpha - \eta}{\xi} \right) - \frac{\nu}{\xi} + |R_r|^2 > |R_r|^2 \quad (3.24)$$

Y de donde obtenemos la desigualdad

$$|\mathcal{M} - C_r|^2 < |R_r|^2$$

que indica que el mapeo de Möbius de un complejo con parte imaginaria negativa y $\xi < 0$ queda dentro del círculo (3.16). Con lo que el teorema queda demostrado. ■

Continuando con el ejemplo mostrado en la figura 3.2, para el caso

$$\mathcal{M} = \frac{2z + 2}{(2 + i)z + (-2 + i)},$$

se puede ver que $\xi = 4 > 0$, por lo que el interior del círculo contiene el mapeo de los complejos con la parte imaginaria positiva, como se aprecia en la figura 3.2.A. Y, similarmente, para

$$\mathcal{M} = \frac{2z + 2}{(-2 + i)z + (2 + i)}$$

se tiene que $\xi = -4 < 0$, lo que implica que los números con la parte imaginaria negativa se mapearán al interior del círculo (3.16).

El mapeo del eje imaginario

De manera similar, el mapeo del eje imaginario, la condición $\Re(z) = 0$ hace que de la expresión (3.15) se obtenga el círculo

$$\begin{aligned} & \left(\mathcal{M} - \frac{(\alpha + \eta) + i(\kappa - \beta)}{2\gamma} \right) \overline{\left(\mathcal{M} - \frac{(\alpha + \eta) + i(\kappa - \beta)}{2\gamma} \right)} \\ &= \left| \frac{ad - bc}{2\gamma} \right|^2 \end{aligned} \quad (3.25)$$

Esto es, el mapeo del eje imaginario genera un círculo con centro en el punto

$$C_I = \frac{(\alpha + \eta) + i(\kappa - \beta)}{2\gamma} \quad (3.26)$$

y radio

$$R_I = \left| \frac{ad - bc}{2\gamma} \right| \quad (3.27)$$

Teorema 2 Sea \mathcal{M} una transformación de Möbius no singular, con $c \neq 0$ y sea $\gamma = \Re(c)\Re(d) + \Im(c)\Im(d)$. Entonces:

1. Si $\gamma > 0$, el interior del círculo descrito por la ecuación (3.25) contiene la mitad del plano complejo que corresponde a los números cuya parte real es positiva.
2. Si $\gamma < 0$, el interior del círculo descrito por la ecuación (3.25) contiene la mitad del plano complejo que corresponde a los números cuya parte real es negativa.
3. Si $\gamma = 0$, no existe el círculo (3.25).

Para probar este teorema demostraremos que la distancia del punto resultante del mapeo de Möbius, de un número complejo con la parte real positiva, al centro del círculo C_I es menor que el radio R_I . Y que, en el caso de mapear un complejo con la parte real positiva, la distancia al centro del círculo C_I es mayor que el radio R_I .

Prueba Supongamos que $\Re(z) > 0$, entonces

$$\begin{aligned} \Re(z) > 0 &\Rightarrow -\Re(z) < 0 \\ &\Rightarrow -|c\mathcal{M} - a|^2\Re(z) < 0 \\ &\Rightarrow -|c\mathcal{M} - a|^2\Re(z) + \gamma|R_I|^2 < \gamma|R_I|^2 \end{aligned}$$

con lo que tenemos la siguiente expresión

$$|\mathcal{M}|^2\gamma - \Re(\mathcal{M})(\alpha + \eta) + \Im(\mathcal{M})(\kappa - \beta) + \mu + \gamma|R_I|^2 < \gamma|R_I|^2. \quad (3.28)$$

Ahora, supongamos que $\gamma > 0$, entonces (3.28) queda como

$$|\mathcal{M}|^2 - \Re(\mathcal{M})\left(\frac{\alpha + \eta}{\gamma}\right) + \Im(\mathcal{M})\left(\frac{\kappa - \beta}{\gamma}\right) + \frac{\mu}{\gamma} + |R_I|^2 < |R_I|^2.$$

Haciendo un poco de álgebra en $\gamma, \alpha, \beta, \eta$ y κ tenemos

$$|\mathcal{M}|^2 - \mathcal{M}\overline{C_I} - \overline{\mathcal{M}}C_I + \frac{\mu}{\gamma} + |R_I|^2 < |R_I|^2$$

con un poco de álgebra es fácil verificar que

$$|C_I|^2 - |R_I|^2 = \frac{\mu}{\gamma}$$

con lo que finalmente tenemos

$$|\mathcal{M} - C_I|^2 < |R_I|^2.$$

Es decir, cuando $\Re(z) > 0$ y $\gamma > 0$, entonces la transformación de Möbius manda a todos los números complejos con parte real positiva, dentro del círculo (3.25).

Consideremos ahora que $\gamma < 0$, entonces (3.28) quedaría como

$$|\mathcal{M}|^2 - \Re(\mathcal{M})\left(\frac{\alpha + \eta}{\gamma}\right) + \Im(\mathcal{M})\left(\frac{\kappa - \beta}{\gamma}\right) + \frac{\mu}{\gamma} + |R_I|^2 > |R_I|^2$$

y haciendo los mismos pasos para el primer caso tenemos

$$|\mathcal{M} - C_I|^2 > |R_I|^2$$

Es decir, cuando $\Re(z) > 0$ y $\gamma < 0$, la transformación de Möbius, mapea todos los números complejos con su parte real positiva, fuera del círculo (3.25).

Con un procedimiento similar se prueba el caso para los números complejos con su parte real negativa. Es decir, cuando $\Re(z) < 0$ y $\gamma > 0$ produce que

$$|\mathcal{M} - C_I|^2 > |R_I|^2$$

y que cuando $\Re(z) < 0$ y $\gamma < 0$ se tiene que

$$|\mathcal{M} - C_I|^2 < |R_I|^2.$$

Con lo que el teorema 2 queda demostrado. ■

3.4.1 Puntos fijos y círculos invariantes

Una propiedad que se estudia en muchas transformaciones y funciones complejas es la localización de los puntos fijos. En esta sección veremos el comportamiento de los puntos fijos de la transformación de Möbius.

Los puntos fijos de una transformación de Möbius, si $c \neq 0$ se localizan en

$$z = \frac{(a - d) \pm \sqrt{(d - a)^2 + 4bc}}{2c} \quad (3.29)$$

Sea el círculo C_f en el plano complejo, con centro z_m en el punto intermedio de los puntos fijos z_1 y z_2 , que se obtienen de (3.29), y con un radio r_m igual a la distancia del punto z_m a cualquiera de los puntos fijos, entonces tenemos que

$$C_z = \frac{z_1 + z_2}{2} = \frac{(a - d)}{2c} \quad (3.30)$$

y el radio queda como

$$R_z = |z_1 - C_z|. \quad (3.31)$$

Con técnicas de visualización hemos encontrado círculos que se mapean en si mismos; a estos círculos les hemos llamado *círculos invariantes*. Esto se presenta en el siguiente teorema:

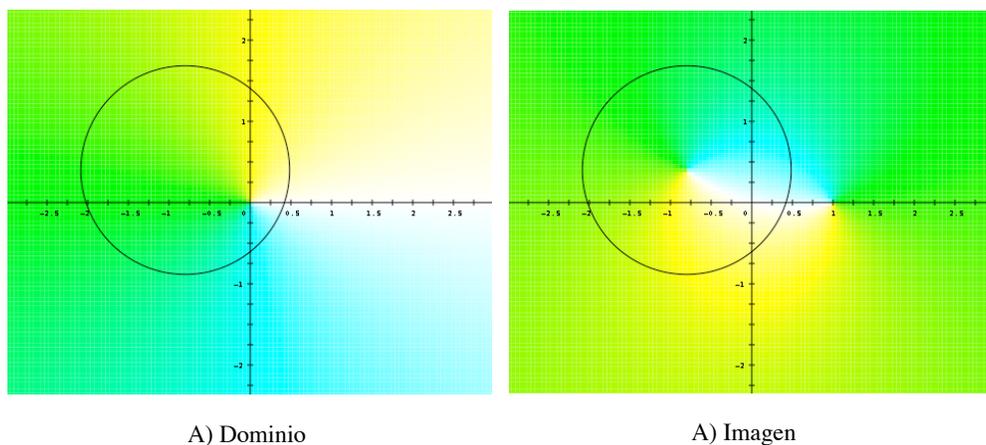


Figura 3.3: Círculo invariante para $m(z) = \frac{-z+1}{(1+0.5i)z+1}$

Teorema 3 Sea M una transformación de Möbius no singular, sobre el plano complejo, y además si las constantes a y d de M son tales que $a = -d$. Entonces $|z - C_z|^2 = |M(z) - C_z|^2$, $\forall z \in \mathbb{C}$ tal que $|z - C_z|^2 = |R_z|^2$. Donde C_z es el punto medio entre los puntos fijos z_1 y z_2 de $m(z)$; y R_z es la distancia de C_z a cualquiera de los puntos fijos z_1, z_2 .

Esto es, decimos que existe un círculo invariante con radio R_z y centro en C_z .

Como la transformación de Möbius tiene la restricción de que $a = -d$, entonces C_z puede escribirse como

$$C_z = \frac{a - d}{2c} = \frac{-d}{c} = \frac{a}{c}$$

Para probar este teorema utilizaremos la forma dada en [67][66], para aplicar el mapeo de la transformación del círculo, como un producto de matrices.

Sabemos que la transformación de Möbius, con $a = -d$ puede expresarse en forma matricial como

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & -a \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

De [67] y [66] sabemos que el círculo H en el plano complejo con centro en C_z y radio R_z puede expresarse como una matriz hermítica

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -C_z \\ -\bar{C}_z & |C_z|^2 - |R_z|^2 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

Es decir, si tenemos una matriz hermítica que representa a un círculo, tiene la forma

$$\Phi = \begin{pmatrix} A & B \\ -\bar{B} & C \end{pmatrix}$$

entonces el centro de este círculo queda en:

$$-\frac{B}{A} \quad (3.34)$$

y el radio correspondiente es:

$$\frac{\sqrt{|B|^2 - AC}}{|A|}. \quad (3.35)$$

Entonces, el mapeo del círculo (3.33) con la transformación de Möbius (3.32) se expresa como

$$\overline{M^{-1T} H M^{-1}}$$

cuyo resultado es

$$\left(\begin{array}{c} -|c|^2 |R_z|^2 \\ \frac{a}{c} |c|^2 |R_z|^2 \end{array} \quad |b|^2 + \frac{a^2 \bar{b}}{c} + \frac{|a|^4}{|c|^2} + |a|^2 (|C_2|^2 - |R_z|^2) \right)$$

De (3.34) el centro C' de este círculo queda en

$$\begin{aligned} C' &= \frac{\frac{a}{c} |c|^2 |R_z|^2}{-|c|^2 |R_z|^2} \\ &= \frac{a}{c}. \end{aligned}$$

Ahora verifiquemos el radio del círculo resultante. Sea z_1 un punto fijo de la transformación de Möbius que estamos considerando. Entonces se tiene que $m(z_1) = z_1$, por lo que se tiene que el radio R' del círculo resultante del mapeo \mathcal{M} del círculo con centro en C_z y radio R_z tiene como radio

$$\begin{aligned} R' &= \left| \frac{a}{c} - z_1 \right| \\ &= |C_z - z_1| \\ &= R_z \end{aligned}$$

Por lo que se ve $C' = C_z$ y $R' = R_z$, por lo tanto, los círculos son iguales.

Este teorema conduce al siguiente corolario:

Corolario 4 Para una transformación de Möbius no singular, sobre el plano complejo, con $a = -d$, entonces

$$|z - C_f|^2 = |\mathcal{M}(z) - C_f|^2 \Leftrightarrow |\mathcal{M}(z) - C_f|^2 = |R_z|^2.$$

3.4.2 Un ejemplo

Veamos un ejemplo. Consideremos la transformación de Möbius dada por

$$\mathcal{M}(z) = \frac{-z + 1}{(1 + 0.5i)z + 1}.$$

De (3.29) localizamos los puntos fijos, de forma numérica, de nuestra transformación en:

$$\begin{aligned} z_1 &\approx 0.41 - 0.03i \\ z_2 &\approx -2.01 + 0.83i. \end{aligned}$$

El centro z_m del círculo invariante C_f queda en

$$z_m = \frac{-1}{(1 + 0.5i)} = -0.8 + 0.4i.$$

El mapeo de este círculo invariante se muestra en la figura (3.3).

3.4.3 Familia de círculos invariantes

En general, hay indicios de que para el caso en que la transformación de Möbius no sea singular, $c \neq 0$ y $a = -d$. Entonces existe una familia de círculos invariantes que pasan por los puntos fijos z_1 y z_2 y cuyo centro está en la línea que es perpendicular a la línea que une a los puntos z_1 y z_2 , como se aprecia en la figura 3.4.

3.5 Integral de Stieltjes

La integral de Stieltjes es una generalización de la integral Riemann. Aunque es conocida por los matemáticos, no es una herramienta muy popular entre profesionistas de matemáticas aplicadas. En esta sección revisaremos brevemente algunas propiedades de esta integral; sin embargo una referencia completa del tema se puede obtener en [25],[26] o en el libro de texto [24].

Para definirla se deben considerar dos funciones acotadas f y g en un intervalo $[a, b]$. Para una partición P

$$P : a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b,$$

definimos

$$\Delta g(x_i) = g(x_{i+1}) - g(x_i),$$

y elegimos en cada intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ ($i = 0, 1, \dots, n - 1$) un punto α_i para formar la suma de Stieltjes

$$\sigma_P = \sum_{i=0}^{n-1} f(\alpha_i) \Delta g(x_i)$$

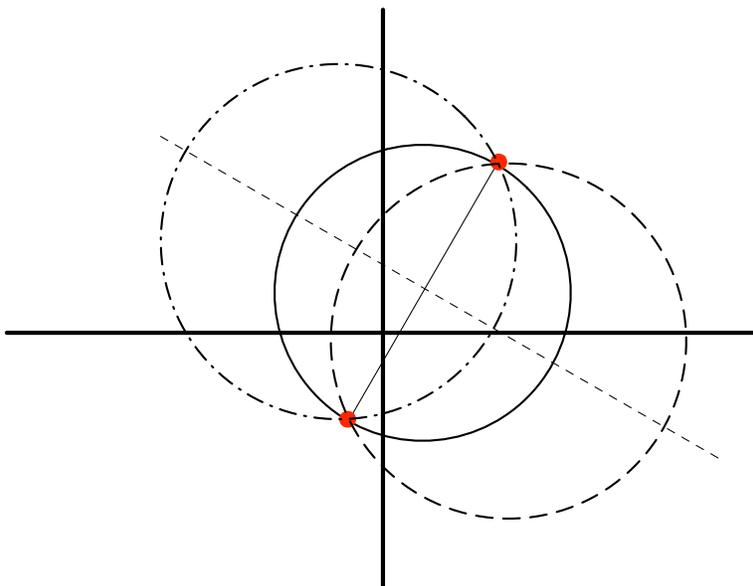


Figura 3.4: Familia de círculos invariantes

Si el límite

$$\lim_{|P_n| \rightarrow 0} \sigma_P = I$$

existe para cada secuencia de particiones $\{P_n\}$ tal que $|P_n| \rightarrow 0$, decimos que I es la integral de Stieltjes de $f(x)$ con respecto a $g(x)$ en el intervalo $[a, b]$ y escribimos

$$I = \int_a^b f(x) dg(x).$$

La función $f(x)$ se denomina el integrando y la función $g(x)$ es el integrador. La integral de Riemann corresponde al caso en que $g(x) = x$.

3.5.1 Condiciones de existencia

Una de las principales preocupaciones en matemáticos es la comprobación de la existencia de resultados. Al manejar integrales de Stieltjes un tema recurrente en la bibliografía es la verificación de la existencia de las integrales de Stieltjes. Además, de las condiciones de existencia se pueden encontrar otras propiedades.

Sea $g(x)$ una función estrictamente creciente en el intervalo $[a, b]$. Entonces $\Delta g(x_i) > 0$ es tal que las condiciones de las sumas de Riemann se pueden aplicar también a las sumas de Stieltjes.

Si consideramos las sumas superiores e inferiores de Darboux-Stieltjes

$$s_P = \sum_{i=0}^{n-1} m_i \Delta g(x_i) \tag{3.36}$$

$$S_P = \sum_{i=0}^{n-1} M_i \Delta g(x_i) \quad (3.37)$$

donde m_i es la menor evaluación de $f(x)$ en el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$. De manera similar M_i es la máxima evaluación de $f(x)$ en el mismo intervalo, entonces se tiene que la suma de Stieltjes respecto a estas sumas es

$$s_P \leq \sigma_P \leq S_P.$$

Y las integrales de Stieltjes superiores e inferiores como

$$I^* = \inf_P \{S_P\}, \quad I_* = \inf_P \{s_P\}.$$

Entonces, para cualquier partición P ,

$$s_P \leq I_* \leq I^* \leq S_P.$$

Haciendo $w_i = M_i - m_i$ podemos ver que, al igual que en las integrales de Riemann, que la integral de Stieltjes existe si y solo si

$$\lim_{|P| \rightarrow 0} (S_P - s_P) = 0,$$

esto es, si y sólo si

$$\lim_{|P| \rightarrow 0} \sum_{i=0}^{n-1} \omega_i \Delta g(x_i) = 0.$$

El siguiente teorema se refiere a la no existencia de la integral de Stieltjes, su demostración se puede encontrar en [24]

Teorema 5 Si $f(x)$ y $g(x)$ tienen una discontinuidad en el mismo punto $x = c \in [a, b]$, entonces la integral de Stieltjes no existe.

3.5.2 Clases de pares de funciones integrables

La existencia de la integral de Stieltjes depende del comportamiento de las funciones $f(x)$ y $g(x)$. En esta sección veremos algunos resultados. La demostración se puede encontrar en [24].

1. Si $f(x)$ es continua y $g(x)$ tiene una variación acotada, entonces la integral de Stieltjes

$$I = \int_a^b f(x) dg(x) \quad (3.38)$$

existe.

2. Si la función $f(x)$ es integrable desde el punto de vista de Riemann y $g(x)$ cumple las condiciones de Lipshitz

$$|g(x') - g(x)| \leq L(x' - x),$$

donde L es una constante y $a \leq x < x' \leq b$, entonces la integral 3.38 existe.

3. Si $f(x)$ es integrable desde el punto de vista de Riemann y $g(x)$ puede representarse como

$$g(x) = c + \int_a^x \phi(t)dt,$$

donde ϕ es una función absolutamente integrable en el intervalo $[a, b]$, entonces la integral 3.38 existe.

Originalmente se considera que la función $g(x)$ es una función monótona estrictamente creciente. Sin embargo, si tenemos dos funciones monótonas crecientes g_1 y g_2 , entonces la diferencia entre ambas es una función que no es monótona creciente $g = g_1 - g_2$ y puede obtenerse la integral de Stieltjes de f con respecto a g como una diferencia de integrales de f con respecto a g_1 y g_2 , esto es

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dg(x) &= \int_a^b f(x)d[g_1(x) - g_2(x)] \\ &= \int_a^b f(x)dg_1(x) - \int_a^b f(x)dg_2(x). \end{aligned}$$

Con lo que se establece que $g(x)$ es una función de variación acotada en el intervalo $[a, b]$

3.5.3 Propiedades de las integrales de Stieltjes

Las siguientes propiedades se obtienen de las definiciones

$$\begin{aligned} \int_a^b dg(x) &= g(b) - g(a) \\ \int_a^b [f_1(x) \pm f_2(x)]dg(x) &= \int_a^b f_1(x)dg(x) \pm \int_a^b f_2(x)dg(x) \\ \int_a^b f(x)d[g_1(x) \pm g_2(x)] &= \int_a^b f(x)dg_1(x) \pm \int_a^b f(x)dg_2(x) \\ \int_a^b kf(x)d[lg(x)] &= kl \int_a^b f(x)dg(x) \end{aligned}$$

donde la existencia de la integral derecha implica la existencia de la integral izquierda. Más aún, para $a < c < b$

$$\int_a^b f(x)dg(x) = \int_a^c f(x)dg(x) + \int_c^b f(x)dg(x) \quad (3.39)$$

si las tres integrales existen. Sin embargo, la existencia de las dos integrales de la derecha en la ecuación 3.39 no implican la existencia de la integral izquierda.

Para resolver una integral de Stieltjes se puede usar el método de integración por partes. Esto se presenta en el siguiente teorema y corolario, cuyas demostraciones se puede ver en [24].

Teorema 6 *Para integrales de Stieltjes la fórmula de integración por partes es*

$$\int_a^b f(x)dg(x) = f(x)g(x)|_a^b - \int_a^b g(x)df(x),$$

asumiendo que una integral exista, se tiene la existencia de la otra.

Corolario 7 *Si $f(x)$ es integrable con respecto a $g(x)$, entonces $g(x)$ es integrable con respecto a $f(x)$.*

3.5.4 Computación de la integral de Stieltjes

Los siguientes teoremas describen la manera de resolver una integral de Stieltjes, como en las secciones anteriores; la demostración se puede encontrar en [24].

Teorema 8 *Si $f(x)$ es una función integrable en el sentido de Riemann y la función $g(x)$ puede representarse como*

$$g(x) = c + \int_a^x \phi(t)dt,$$

donde $\phi(t)$ es una función absolutamente integrable en el intervalo $[a, b]$, entonces

$$\int_a^b f(x)dg(x) = \int_a^b f(x)\phi(x)dx \quad (3.40)$$

Teorema 9 *Si la función $f(x)$ es integrable en el sentido de Riemann, $g(x)$ es una función continua por intervalos y $g'(x)$ es absolutamente integrable en $[a, b]$. Entonces*

$$\int_a^b f(x)dg(x) = \int_a^b f(x)g'(x)dx \quad (3.41)$$

Teorema 10 *Considere que $f(x)$ es una función continua en el intervalo $[a, b]$ y que la función $g(x)$ es diferenciable por intervalos con una derivada absolutamente diferenciable $g'(x)$. Además si asumimos que la función $g(x)$ tiene discontinuidades de primer tipo en los puntos*

$$a = c_0 < c_1 < c_2 < \cdots < c_m = b.$$

Entonces la integral de Stieltjes existe y

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dg(x) &= \int_a^b f(x)g'(x)dx + f(a)[g(a+) - g(a)] + \\ &\quad \sum_{k_1}^{m-1} f(c_k)[g(c_k+) - g(c_k-)] + f(b)[g(b) - g(b-)]. \end{aligned} \quad (3.42)$$

3.5.5 El teorema del valor medio y estimados

Uno de los resultados mas importantes de la integral de Stieltjes es el teorema del valor medio, debido a que los resultados de la computación de la integral se simplifican en una evaluación de la función integradora en los intervalos. Este teorema establece lo siguiente:

Teorema 11 Sea $f(x)$ una función acotada en $[a, b]$, tal que

$$m \leq f(x) \leq M,$$

y $g(x)$ es una función monótona creciente. Si la integral de Stieltjes

$$I = \int_a^b f(x)dg(x)$$

existe, entonces

$$I = k[g(b) - g(a)], \quad (3.43)$$

donde $m \leq k \leq M$.

Antes de pasar al siguiente teorema, definiremos el concepto de variación del integrador.

Definición 2 La variación de $g(x)$ en el intervalo $[a, b]$ se define como

$$V_{a,b}g(x) = \sup_P \sum_{i=1}^k |g(x_i) - g(x_{i-1})|$$

donde los rangos supremos sobre las particiones P de la forma

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

son finitos.

Teorema 12 Si $f(x)$ es continua en $[a, b]$ y $g(x)$ tiene una variación acotada en $[a, b]$, entonces

$$\int_a^b |f(x)dg(x)| \leq MV \quad (3.44)$$

donde $M = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)|$ y $V = V_{a,b}g(x)$.

3.6 Conclusiones

Aunque la transformación de Möbius ha sido estudiada ampliamente, aun quedan algunas propiedades geométricas sobre el plano complejo que no han sido totalmente estudiadas. En este capítulo hemos establecido algunos criterios para determinar si, dada una transformación de Möbius, el mapeo de los ejes reales e imaginario del plano complejo a través de dicha transformación resultan en un círculo o en un círculo de-generado de radio infinito en el \mathcal{M} -plano. Además, también se tienen condiciones para saber, dada una transformación de Möbius, que parte del semiplano se mapea dentro o fuera de los círculos en el \mathcal{M} -plano asociados a los ejes real e imaginario del plano complejo.

Con técnicas de visualización, se encontró la existencia de círculos invariantes en la transformación de Möbius, específicamente, cuando se cumple que $a = -d$ en (3.1). Esta propiedad también se demostró de forma analítica en la sección 4.4.1. El centro de los círculos es el punto medio de los puntos fijos y el radio es la distancia del centro a uno de los puntos fijos. Además, experimentos numéricos nos han mostrado que podemos establecer una familia de círculos invariantes con la misma forma de la transformación de Möbius. Esta familia de círculos tiene su centro en la línea perpendicular a la línea que une dos puntos fijos y que pase por el punto medio de los puntos fijos, y que toque a los puntos fijos.

La integral de Stieltjes no es un tema común para profesionistas que utilizan diariamente herramientas matemáticas avanzadas, como lo son ingenieros, físicos y químicos. Por lo que resultan escasas las fuentes de donde se obtiene información de este tipo de integrales. Además, algunas de sus propiedades pueden ayudar en la generación de nuevos métodos numéricos donde se pueda bajar la complejidad de las computaciones realizadas, o para reducir el error de aproximación.

Capítulo 4

Estudio geométrico de la función m de Weyl-Titchmarsh

La teoría de Weyl, o problema singular de Sturm-Liouville, permite obtener un sustento teórico-matemático ideal para el estudio de paquetes de onda con regiones de espectro continuo. Las singularidades asociadas a la función $q(x)$ en el operador diferencial de Sturm-Liouville, al igual que los intervalos infinitos y semi-infinitos donde se define el problema, se relacionan con la aparición de espectros continuos. Además se sabe que la parte imaginaria de la función m de Weyl-Titchmarsh, que aparece en las soluciones cuadráticamente integrables de la teoría de Weyl, establece una relación con la función de densidad espectral. Esta relación nos permite manejar el espectro continuo a través de la función de densidad espectral, la cual es necesaria para la construcción de los paquetes de onda como integrales de Stieltjes. Se ha hecho bastante trabajo de investigación numérico y teórico sobre el problema singular de Sturm-Liouville, en este capítulo se presentan algunos resultados clásicos en esta extensa área y aportaciones que hacemos a la teoría: estudio geométrico de la función m de Weyl tomando como referencia el teorema 1 sobre el mapeo de semiplanos, con el objetivo de hacer más entendibles algunos resultados y establecer una solución alternativa a la computación de la función m de Weyl-Titchmarsh mediante la propuesta de una familia de soluciones para el problema valores iniciales del problema de Sturm-Liouville.

4.1 Teoría de Sturm-Liouville

La teoría de Sturm-Liouville ha influenciado el desarrollo de otras áreas del análisis matemático como son: integral de Lebesgue, espacios de Hilbert cuadráticamente integrables, teoría de funciones complejas en el espacio \mathbb{C} , teoría espectral de operadores diferenciales o teoría espectral de operadores no acotados en espacios de Hilbert.

Charles François Sturm y Joseph Liouville realizaron una serie de trabajos hacia 1830 sobre el problema de valor en la frontera considerando un operador diferencial L sobre un conjunto de funciones.

$$Ly(x) = \left(-\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} \right\} + q(x) \right) y(x) = \lambda y(x) \quad (4.1)$$

donde $q(x)$ es una función continua en el intervalo $[a, b]$. El problema de Sturm-Liouville considera al operador L , ecuación (4.1), con las condiciones en la frontera

$$\begin{aligned} y(a) \cos \alpha + y'(a) \operatorname{sen} \alpha &= 0 \\ y(b) \cos \beta + y'(b) \operatorname{sen} \beta &= 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

Se dice que y es una función propia de L si $Ly = \lambda y$, y λ es el valor propio correspondiente.

En la teoría moderna de Sturm-Liouville, al trabajo original desarrollado por Sturm y Liouville se le conoce como el problema regular de Sturm-Liouville. Se dice que un problema de Sturm-Liouville es regular si el intervalo $[a, b]$ es finito y la función $q(x)$ es sumable en este intervalo. Desde el documento de Dixon [68] se complementa que $q(x)$ cumpla con las condiciones de integrabilidad de Lebesgue, donde una integral de Lebesgue se denota por \mathcal{L} la cual es una integral sobre espacios medibles. Así, el espacio de funciones de Hilbert $\mathcal{L}^2((a, b); \omega)$ dado en un intervalo (a, b) y con el peso ω , es el conjunto de funciones complejas medibles f definidas sobre (a, b) tal que

$$\int_a^b \omega(x) |f(x)|^2 dx < \infty. \quad (4.3)$$

En este trabajo se considera el espacio de funciones de Hilbert $\mathcal{L}^2((a, b))$ donde $\omega = 1$, al que llamaremos espacio de funciones cuadráticamente integrables. En caso de que el intervalo $[a, b]$ sea infinito, semi-infinito o si $q(x)$ no es sumable en el intervalo, el problema se considera singular. Una excelente discusión sobre el problema regular de Sturm-Liouville se encuentra en el capítulo 8 de [69] y en el capítulo 1 de [27]. En esta sección presentamos brevemente los resultados importantes de este problema que son el teorema de comparación y el teorema de oscilación.

Como se establece en [27], se puede considerar al problema en la frontera de las ecuaciones (4.1) y (4.2), donde $a = 0$ y $b = \pi$. De hecho un intervalo arbitrario $[a, b]$ puede mapearse a $[0, \pi]$ por medio de la transformación $t = \frac{x-a}{b-a} \phi$, la cual no altera a (4.1) y a las condiciones de (4.2).

Dos funciones propias $y(x, \lambda_1)$ y $y(x, \lambda_2)$ correspondientes a dos valores propios diferentes son ortogonales, esto es

$$\int_0^\pi y(x, \lambda_1) y(x, \lambda_2) dx = 0, \quad \lambda_1 \neq \lambda_2.$$

Además, los valores propios del problema en la frontera (4.1) y (4.2) son reales.

Teorema 13 Si $q(x)$ es una función continua en el intervalo $[a, b]$, entonces para cualquier α existe una única solución $\psi(x, \lambda)$, $x \in [a, b]$, de la ecuación (4.1), tal que $\psi(a, \lambda) = \sin \alpha$ y $\psi'(a, \lambda) = -\cos \alpha$.

Para cualquier $x \in [a, b]$ fijo, $\psi(x, \lambda)$ es una función entera de λ .

4.1.1 Teoría de Sturm sobre la distribución de ceros de la solución

El estudio de la distribución de los ceros de las funciones propias, permitió a Sturm probar la existencia de una infinidad de valores propios para el problema del valor en la frontera (4.1), (4.2).

Si se considera el problema de valor en la frontera más sencillo:

$$y'' + \lambda y = 0, \quad y'(0) = y(\pi) = 0$$

con las funciones propias

$$\rho_0(x) = 1, \rho_1(x) = \cos x, \rho_2(x) = \cos 2x, \dots, \rho_n(x) = \cos nx, \dots$$

y sus correspondientes valores propios

$$\lambda_0 = 0, \lambda_1 = 1^2, \lambda_2 = 2^2, \dots, \lambda_n = n^2, \dots$$

Las funciones propias están ordenadas por el incremento de los valores propios, iniciando en cero. Se observa que sus raíces poseen las siguientes propiedades

1. La n -ésima función propia en el intervalo $[0, \pi]$ tiene precisamente n ceros.
2. Los ceros de la n -ésima función propia y los de la $(n + 1)$ -ésima función propia se entrelazan. Esto es, hay un cero de la $(n + 1)$ -ésima función propia entre dos ceros consecutivos cualquiera de la n -ésima función propia.

Estas propiedades son válidas para el caso general.

De estas observaciones se deriva el principal teorema de Sturm.

Teorema 14 (Teorema de Sturm) Considere las siguientes ecuaciones diferenciales de segundo orden

$$u'' + g(x)u = 0 \tag{4.4}$$

$$v'' + h(x)v = 0 \tag{4.5}$$

en el intervalo $[a, b]$. Si $g(x) < h(x) \quad \forall x \in [a, b]$, existe al menos, un cero de cada solución de (4.5) entre cualesquiera dos ceros de cualquier solución no trivial de (4.4).

Uno de los resultados mas importantes en la teoría de Sturm-Liouville, es el teorema de comparación, para el cual se debe considerar que cualquier solución de la ecuación

$$y'' + g(x)y = 0, \quad -\infty \leq a \leq x \leq b \leq +\infty \tag{4.6}$$

para $g(x) < -m^2 < 0$ no puede tener más que un cero.

Teorema 15 (Teorema de Comparación) *Sea $u(x)$ la solución de la ecuación (4.4) que cumple con las siguientes condiciones iniciales*

$$u(a) = \sin \alpha, \quad u'(a) = -\cos \alpha \quad (4.7)$$

y sea $v(x)$ la solución de la ecuación (4.5) con las mismas condiciones iniciales. Más aun, suponga que $g(x) < h(x)$ en todo el intervalo $[a, b]$. Entonces si $u(x)$ tiene m ceros en $a < x \leq b$, $v(x)$ no tiene más de m ceros en el mismo intervalo y el k -ésimo cero de $v(x)$ es menor que el k -ésimo cero de $u(x)$

El teorema de comparación nos permite ver el comportamiento del espectro de dos problemas regulares y la relación con las funciones q , u y v en (4.4) y (4.5).

El otro resultado importante en el problema regular es el teorema de oscilación.

Teorema 16 (Teorema de oscilación de Sturm) *Existe una secuencia creciente indefinida de valores propios $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_n, \dots$ del problema del valor en la frontera (4.1), (4.2), y la función propia correspondiente al valor propio λ_m , tiene precisamente m ceros en el intervalo $a < x < b$.*

4.2 El problema singular de Sturm-Liouville

En 1910, el caso del problema singular de Sturm-Liouville fue tratado en la tesis doctoral de Hermann Weyl, dirigida por Hilbert [70]. La teoría de Sturm-Liouville de operadores diferenciales en espacios de funciones de Hilbert fue desarrollada por Glazman, Akhiezhierzer, Hellwig, von Neumann y Stone entre otros, hacia 1920. Una excelente discusión del desarrollo histórico de la teoría de Sturm-Liouville se puede encontrar en [20] y [71].

En el problema singular de Sturm-Liouville o teoría de Weyl, la función m de Weyl-Titchmarsh juega un papel fundamental en la clasificación de las soluciones. Esta clasificación se establece a partir de las propiedades geométricas del mapeo del eje real al m -plano, denominado círculo y punto límite. En las siguientes sección haremos un estudio geométrico de esta función.

El problema principal en la teoría de Weyl es determinar si existe una solución al problema descrito por (4.1) y (4.2) que esté en $\mathcal{L}^2(a, b)$, es decir una solución que pertenezca al conjunto de funciones cuadráticamente integrables en el intervalo (a, b) . Determinar la existencia de una solución cuadráticamente integrable se apoya en lo siguiente: Consideremos que existen dos soluciones ψ y φ del problema (4.1) con $\lambda \in \mathbb{C}$ y que cumplen con las siguientes condiciones iniciales

$$\cos \alpha \varphi(a, \lambda) - \operatorname{sen} \alpha p(a) \varphi'(a, \lambda) = 0 \quad (4.8)$$

$$\operatorname{sen} \alpha \psi(a, \lambda) + \cos \alpha p(a) \psi'(a, \lambda) = 0 \quad (4.9)$$

donde $\alpha \in [0, \pi)$. Estas condiciones iniciales hacen que las soluciones ψ y φ linealmente independientes. Es posible establecer la condición de independencia lineal de φ y ψ

por el hecho de que el operador L en (4.1) es de orden 2. Esta condición simplemente consiste en probar que el wronskiano de φ y ψ es distinto de cero, esto es

$$W[\varphi, \psi](x) = \varphi(x, \lambda)\psi'(x, \lambda) - \varphi'(x, \lambda)\psi(x, \lambda) \neq 0 \quad (4.10)$$

Por otro lado, φ, φ', ψ y ψ' son funciones enteras de λ y continuas en el punto (x, λ) , para $x \in (a, b)$ y λ constante, [69], capítulo 9.

Es bien sabido que la combinación lineal de dos soluciones al problema (4.1) es otra solución. Por tanto, la solución cuadráticamente integrable que buscamos es combinación lineal de las funciones solución φ y ψ . Entonces, podemos establecer que la función que buscamos es $\chi \in \mathcal{L}^2(a, b)$ y es igual a

$$\chi(x, \lambda) = \varphi(x, \lambda) + m\psi(x, \lambda) \quad (4.11)$$

χ cumple con las condiciones de frontera indicadas en (4.2) En esta ecuación podemos notar que es m el factor que establece la condición para que la función χ sea cuadráticamente integrable.

Entonces χ cumple con las condiciones en la frontera establecidas en (4.2). Al sustituir $\chi(x, \lambda)$ en la condición de frontera para el punto b se tiene

$$(\varphi(x, \lambda) + m\psi(x, \lambda)) \cos \beta + p(b)(\varphi'(x, \lambda) + m\psi'(x, \lambda)) \text{sen} \beta = 0 \quad (4.12)$$

Entonces si despejamos a m de (4.12) tenemos

$$m = -\frac{\varphi(x, \lambda) \cos \beta + p(x)\varphi'(x, \lambda) \text{sen} \beta}{\psi(x, \lambda) \cos \beta + p(x)\psi'(x, \lambda) \text{sen} \beta} \quad (4.13)$$

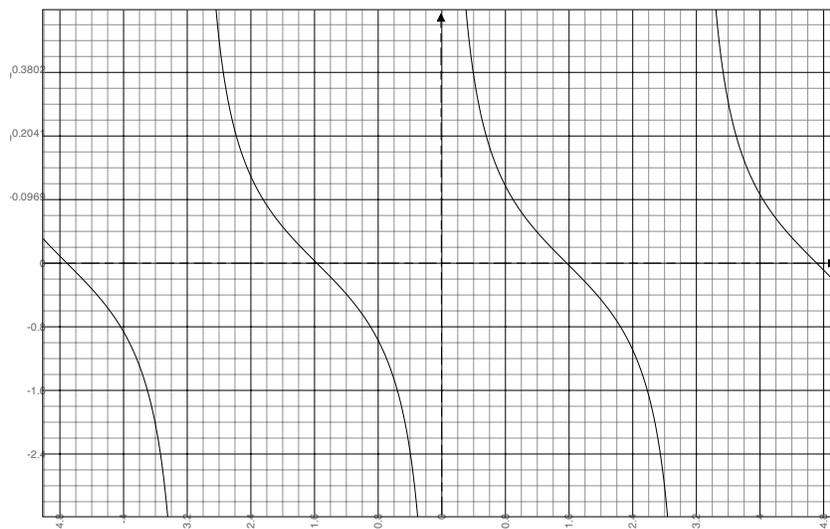
En esta ecuación se observa que m depende de x, λ y β , tal que podemos reescribir a la función m como

$$m(x, \lambda, \beta) = -\frac{\varphi(x, \lambda) \cot \beta + p(x)\varphi'(x, \lambda)}{\psi(x, \lambda) \cot \beta + p(x)\psi'(x, \lambda)} \quad (4.14)$$

La función m , ecuación (4.14), tiene la forma de una transformación de Möbius si se considera que $\cot \beta \in (-\infty, \infty)$ para $\beta \in (0, \pi)$, como se muestra en la figura (4.1). Entonces esta función realiza un mapeo del eje real a un círculo en el m -plano. El estudio geométrico del mapeo de círculo resultante, conocido como círculo de Weyl, se hace en las siguiente sección.

4.3 Casos círculo límite y punto límite

Una vez que se han presentado algunas propiedades geométricas del mapeo de Möbius en el m -plano, podemos hacer lo propio con las propiedades de las soluciones dependiendo de las características del círculo de Weyl.

Figura 4.1: Función $\cot \beta$

Uno de los resultados principales de la tesis doctoral de Hermann Weyl [70] es la clasificación de soluciones para el problema singular de Sturm-Liouville. Esta clasificación se hace viendo el comportamiento del límite de la función $m(x, \lambda, \beta)$ conforme $b \rightarrow \infty$, siempre que $\Im(\lambda) \neq 0$, es decir

$$\lim_{b \rightarrow \infty} m(b, \lambda, \beta) = \lim_{b \rightarrow \infty} -\frac{\varphi(b, \lambda) \cot \beta + p(b)\varphi'(b, \lambda)}{\psi(b, \lambda) \cot \beta + p(b)\psi'(b, \lambda)}. \quad (4.15)$$

Para que este límite exista, se considera un valor constante para λ tal que $\Im(l) \neq 0$. El resultado de este límite es un círculo que contiene el mapeo de β cuando barre de 0 a π , que se traduce en todo el eje real cuando se evalúa $\cot \beta$. Entonces se tiene un círculo límite conforme $b \rightarrow \infty$. La clasificación de funciones solución al problema singular de Sturm-Liouville que establece Weyl, depende precisamente de la longitud del radio asociado al círculo límite. Cuando el radio es distinto de cero se tiene el caso de círculo límite y si el radio tiende a cero, entonces se tiene el caso de punto límite.

Círculo límite En este caso, se considera que todas las soluciones al problema singular de Sturm-Liouville son cuadráticamente integrables para $\lambda \in \mathbb{C}$.

Punto límite Si la ecuación (4.1) cae en el caso punto límite entonces existe al menos una solución no nula a la ecuación (4.1) que pertenece al espacio de funciones Hilbert $\mathcal{L}^2(0, \infty)$. Esta solución es $\chi = \varphi + m\psi$.

Coddington y Levinson [69] proporcionan un colorario para establecer si se tiene un problema singular que cae en el caso de punto límite.

Corolario 17 Si $p(x) = 1$ en la ecuación (4.1) para $0 \leq t < \infty$ y $q(t) \geq -kt^2$ para alguna constante positiva k , entonces L cae en el caso de círculo límite al infinito.

Debido a que en el caso de punto límite todos los elementos se mapean al mismo punto, se puede hacer que la función m se divida por $\cot \beta$ en el numerador y denominador y elegir a $\beta = \pi$, tal que $\cot \beta = \infty$. Entonces obtenemos a la función m independiente de β expresada como

$$\lim_{b \rightarrow \infty} m(b, \lambda, \pi) = - \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{\varphi(b, \lambda)}{\psi(b, \lambda)} \quad (4.16)$$

Este resultado no debe sorprendernos, ya que corresponde con el valor asintótico de la transformación de Möbius cuando $z \rightarrow \infty$, es decir, si $M(z)$ es una transformación de Möbius no singular, entonces

$$\lim_{z \rightarrow \infty} M(z) = \lim_{z \rightarrow \infty} - \frac{az + b}{cz + d} = - \frac{a}{c}$$

Los trabajos de Titchmarsh aportaron propiedades analíticas a partir de técnicas de variable compleja al estudio del problema de valores a la frontera de en el problema regular de Sturm-Liouville. Resultados principales de Titchmarsh para el problema singular de Sturm-Liouville es la prueba de convergencia, en las condiciones del tipo de Fourier, de la serie de funciones propias.

Titchmarsh demostró que el conjunto ortogonal de funciones propias ϕ_0, ϕ_1, \dots del problema singular de Sturm-Liouville es completo en el espacio de funciones de Hilbert de las funciones cuadráticamente integrables $\mathcal{L}^2(a, b)$. Si se tiene un elemento $f \in \mathcal{L}^2(a, b)$ entonces los coeficientes c_k de Fourier se definen por

$$c_k = \int_a^b \phi_k(x) f(x) dx,$$

y se tiene la identidad de Parseval

$$\int_a^b |f(x)|^2 dx = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2.$$

En la teoría general de operadores lineales no acotados en un espacio de Hilbert, la clasificación de punto y círculo límite desarrollada por Weyl, se ha reemplazado por el concepto de deficiencia del índice del operador simétrico mínimo cerrado en el espacio de funciones de Hilbert[72].

4.4 La función m y el mapeo de semiplanos

Como se ha comentado, existen una relación entre la función m que aparece en las soluciones cuadráticamente integrables del problema singular de Sturm-Liouville y la

función de Möbius. En esta sección establecemos una relación entre las soluciones ψ y φ con el teorema del mapeo de semiplanos (teorema 1), que hemos discutido en el capítulo 3.

Las principales propiedades en el mapeo del plano complejo que involucran a la función m las realizó Titchmarsh en [73][74]. Titchmarsh mostró, que el coeficiente m necesario para obtener una solución en $\mathcal{L}^2(0, \infty)$ es una función analítica y que al menos existe una para cada problema singular de Sturm-Liouville. Esta función m debe tener las siguientes propiedades en el espacio de valores propios (plano complejo), siempre que $\lambda \in \mathbb{C}$ y $\Im(\lambda) \neq 0$.

1. $m(\lambda)$ es regular.
2. $\overline{m(\lambda)} = m(\overline{\lambda})$.
3. $\Im(m(\lambda)) > 0$ para todo λ con $\Im(\lambda) > 0$.
4. $\Im(m(\lambda)) < 0$ para todo λ con $\Im(\lambda) < 0$.
5. La función analítica m que se considera en el semiplano superior de \mathbb{C} puede o no tener continuación analítica en el semiplano inferior de \mathbb{C} . Y si tiene continuación analítica, entonces la función m puede o no ser analítica en el semiplano inferior.

Tomando en consideración las propiedades de la función de Möbius para explicar el comportamiento de la función m de Weyl, la primera relación que podemos establecer radica en el hecho en que esta transformación tiene sentido siempre que sea no singular, es decir que $ab - bc \neq 0$. En la teoría de Weyl, esta condición equivale a que el wronskiano de las soluciones φ y ψ sea distinto de cero, es decir, que las funciones φ y ψ sean linealmente independientes, ecuación (4.10).

Las propiedades del mapeo de Möbius se presentan en la función m siempre que las soluciones φ y ψ sean linealmente independientes.

Al tener la forma de una transformación de Möbius, la función m mapea el eje real a un círculo C_m en el m -plano con radio R_r con centro en el punto C_r . Si tenemos que las soluciones ψ y φ , que se utilizan para construir a la función m , son funciones complejas. Más aun, son funciones enteras respecto a λ .

Sustituyendo las soluciones ψ y φ en la expresión para el radio R_r , en la ecuación (3.18) tenemos

$$R_r = \left| \frac{p(\varphi\psi' - \psi\varphi')}{2(\Re(\psi)\Im(\psi') - \Im(\psi)\Re(\psi'))} \right|.$$

Si las funciones ψ y φ tienen los valores en el punto a , como se muestra

$$\begin{aligned} \varphi(a, \lambda) &= \text{sen } \alpha & \psi(a, \lambda) &= \cos \alpha \\ p(a)\varphi'(a, \lambda) &= -\cos \alpha & p(a)\psi'(a, \lambda) &= \text{sen } \alpha \end{aligned} \tag{4.17}$$

para algún $\alpha \in [0, \pi)$, entonces ψ y φ cumplen con la condiciones iniciales que se expresan en las ecuaciones (4.8) y (4.9).

Sea $[fg](x)$ la operación definida como

$$[fg](x) = p(x)(f(x)\bar{g}'(x) - f'(x)\bar{g}(x)),$$

y si evaluamos $[\varphi\bar{\psi}](x)$ en a tenemos

$$\begin{aligned} [\varphi\bar{\psi}](a) &= p(x)(\varphi(x)\psi'(x) - \varphi'(x)\psi(x)) \\ &= \text{sen}^2 \alpha + \text{cos}^2 \alpha = 1. \end{aligned}$$

Se sabe que como φ y ψ son soluciones del mismo $Lx = \lambda x$, para λ complejo, entonces $[\varphi\bar{\psi}](x)$ es constante $\forall x \in [a, b]$, capítulo 9 de [69].

Entonces, de la discusión de mapeo de la transformación de Möbius sobre el eje real, podemos ver que el círculo asociado a la función m tiene centro C_r y radio R_r como sigue

$$R_r = \left| \frac{1}{2\xi} \right| = \left| \frac{1}{2(\Re(\psi)Im(\psi') - \Im(\psi)\Re(\psi'))} \right| \quad (4.18)$$

$$C_r = \frac{i(\varphi\bar{\psi}' - \varphi'\bar{\psi})}{2(\Re(\psi)Im(\psi') - \Im(\psi)\Re(\psi'))} \quad (4.19)$$

Consideremos el caso de la función m donde ϕ y ψ son funciones reales, entonces del teorema de mapeo de semiplano para el caso del eje real, tenemos que la transformación de Möbius si $\xi = 0$, entonces no existe círculo. Esto implica que la función m tiene una discontinuidad que se traduce en que el radio que describe el círculo del eje real en el m -plano es infinito, como se aprecia en la siguiente expresión

$$R_r = \left| \frac{1}{2\xi} \right| = \left| \frac{1}{2(\Re(\psi)Im(\psi') - \Im(\psi)\Re(\psi'))} \right| \quad (4.20)$$

Lo cual coincide con lo que se describe en Coddington y Levinson, donde establecen que las soluciones al problema definido por (4.1) y (4.2) con $\lambda \in \mathbb{R}$ son funciones reales y que la función m es meromorfa en el λ -plano, con polos en el eje real, donde los polos corresponden a valores propios del problema singular de Sturm-Liouville. Ejemplos de estos polos se pueden apreciar en las figuras (5.3) y (5.17).

Desde los trabajos de Titchmarsh y Levintan [73][27], se conoce la relación que hay entre el signo de la parte imaginaria del valor propio λ y el mapeo de semiplano que aparece en el problema singular de Sturm-Liouville. Este lema se escribe de la siguiente forma:

Lema 1 Si $\Im(\lambda) > 0$, entonces el semiplano superior de \mathbb{C} , de los complejos con la parte imaginaria positiva, se mapea al exterior del círculo determinado por las expresiones (4.19) y (4.18).

Prueba Si tomamos la representación para el radio R_r dada en el capítulo 9 de [69], Podemos tener que ξ también puede expresarse como

$$\xi = -\Im(\lambda) \int_0^b |\psi(t, \lambda)|^2 dt. \quad (4.21)$$

El signo de ξ lo determina la parte imaginaria del valor propio λ , como se aprecia en la ecuación (4.21), ya que el valor de la integral $\int_a^b |\psi(x, \lambda)|^2 dx$ siempre es positivo. Esto coincide con el hecho de que $\Im(\lambda) > 0$, entonces $\xi < 0$ entonces, el semiplano que se mapea al interior del círculo de Weyl es el que corresponde los complejos con la parte imaginaria negativa. Por tanto, el semiplano superior se mapea al exterior del círculo de Weyl determinado por (4.19) y (4.18). ■

4.5 Una familia de soluciones $\psi(x, \lambda)$

Como se puede observar en la ecuación (4.14), la función m de Weyl-Titchmarsh está escrita en términos de los valores x, λ y β . Sin embargo, las soluciones ψ y φ del problema (4.1) y (4.2) que componen a la función m de Weyl únicamente dependen de los valores x y λ . Si analizamos el teorema (1), teorema del *mapeo de semiplano*, y consideramos los polos de la función la función m , podemos formar una familia de soluciones ψ que nos ayuden a contruir a la función m . Para ello debemos ver el comportamiento en cada uno de los dominios de ψ y φ . También se debe considerar los polos de m pues se sabe que los polos de de la función m están relacionados con los valores propios del problema singular de Sturm-Liouville.

En ambos casos, podemos conjeturar que la función ψ debe ser puramente real o puramente imaginaria para que se obtenga una discontinuidad en la función m , ya que de ser así claramente $\xi = 0$. Este resultado geométrico coincide con lo expresado por Coddington y Levinson [69], cuando indican que las funciones φ, φ', ψ y ψ' son funciones enteras en $\lambda \in \mathbb{C}$ y reales para $\lambda \in \mathbb{R}$, por lo tanto, la función m es una función meromorfa en λ con polos simples y reales.

4.5.1 Dominio de x

Si la función ψ tiene la forma general

$$\psi(x) = e^{ig_\lambda(x)} \quad (4.22)$$

donde $g(x)$ es una función real y derivable al menos una vez, entonces la derivada de ψ quedaría como

$$\psi'(x) = ig'_\lambda(x)e^{ig(x)} \quad (4.23)$$

Es fácil obtener que si $\psi(x) = e^{ig(x)}$ en la función m , entonces, $2\xi = g'_\lambda(x)$. Consideremos ahora el comportamiento de $g'_\lambda(x)$ para los casos de punto límite y círculo límite.

Iniciemos con el caso de círculo límite. En este caso la función $g'_\lambda(x)$ debe ser acotada, es decir

$$\lim_{x \rightarrow \infty} g'_\lambda(x) = \frac{2}{K},$$

donde $|K|$ es el radio del círculo. Note que para el dominio de x , ξ nunca debe ser cero ya que los polos de la función sólo aparecen en el dominio de los valores propios λ . Por el lema (1), tenemos que si $\Im(\lambda) > 0$ entonces se tiene que $g'_\lambda(x)$ es una función monótona decreciente negativa y K es una constante real negativa. Análogamente si $\Im(\lambda) < 0$, entonces $g'_\lambda(x)$ es una función monótona creciente estrictamente positiva y K es una constante real positiva.

De esta forma, la función m se escribe de la forma

$$m(b, \lambda, z) = \frac{\varphi(b)z + \varphi'(b)}{e^{ig_\lambda(b)}z + ig'_\lambda(b)e^{ig_\lambda(b)}} \quad (4.24)$$

Esta disposición cambia el problema de encontrar las soluciones ψ y φ , al estudio de la función $g_\psi(x)$. Si además agregamos el resultado del mapeo del semiplano pero dependiente de la parte imaginaria del valor propio asociado al problema (4.1)(4.2), como se expresa en el capítulo 2 del libro de Levitan y Sargsjan [27], ya que esto indica que el valor ξ siempre es positivo o negativo (en caso de existir el círculo), lo que acota la familia de funciones que se busca.

En el caso de punto límite, si $\Im(\lambda) < 0$, entonces la derivada de la función $g_\lambda(x)$ es monótona creciente estrictamente positiva y tiende a infinito, conforme x tiende a infinito. Similarmete, si $\Im(\lambda) > 0$, entonces $g'_\lambda(x)$ es una función decreciente estrictamente negativa y tiende a menos infinito conforme x tiende a infinito.

Teorema 18 Sea $\psi(x) = e^{ig_\lambda(x)}$ una solución al problema (4.1),(4.2), donde $g_\lambda(x)$ es una función real en el intervalo $[a, b]$. Entonces:

- Si $\Im(\lambda) < 0$ la función $g'_\lambda(x)$ es una función positiva monótona no decreciente.
- Si $\Im(\lambda) > 0$ entonces $g'_\lambda(x)$ es una función negativa monótona no creciente.

Prueba La demostración es sencilla. El radio del círculo va disminuyendo conforme b tiende a infinito. Se sabe que los círculos de menor radio se encuentran dentro de los de radio mayor. En ambos casos los radios dependen de $2\xi = g'_\lambda(x)$, por lo que $g'_\lambda(x)$ es una función monótona no decreciente positiva, o monótona no creciente negativa. ■

Ahora para completar la construcción de la función m de Weyl-Titchmarsh debemos encontrar una solución φ que sea linealmente independiente de ψ . De [75] sabemos que si ψ es solución, entonces $\bar{\psi}$ es solución, por lo que primero proponemos una solución $u(x)$ al problema singular de Sturm-Liouville. Esta solución $u(x)$ es linealmente independiente de ψ . Ahora apliquemos Gram Schmidt para encontrar la solución ortogonal φ .

Iniciemos proponiendo la siguiente solución $u(x)$ al problema singular de Sturm-Liouville,

$$u(x) = e^{-ig_\lambda(x)} \quad (4.25)$$

La función $u(x)$ es linealmente independiente a $\psi = e^{ig_\lambda(x)}$ como se aprecia en el wronskiano

$$\begin{vmatrix} \psi(x) & u(x) \\ \psi'(x) & u'(x) \end{vmatrix} = ig'_\lambda(x)(e^{ig_\lambda(x)}e^{-ig_\lambda(x)} + e^{ig_\lambda(x)}e^{-ig_\lambda(x)}) = 2ig'_\lambda(x) \quad (4.26)$$

Ahora aplicamos el proceso de Gram Schmidt, utilizando a las funciones $u(x)$ y $\psi(x)$ como sigue:

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= u(x) + a\psi(x) \\ &= e^{-ig_\lambda(x)} - \frac{(b-a)e^{ig_\lambda(x)}}{\int_a^b |e^{ig_\lambda(x)}|^2 dx} \end{aligned} \quad (4.27)$$

Ahora tenemos una familia de soluciones φ y ψ para construir la función m de Weyl-Titchmarsh.

4.5.2 Familia de soluciones para el dominio de valores propios

Las soluciones al problema singular de Sturm-Liouville dependen de dos dominios, el de X y el de los valores propios. En la sección anterior ψ se presentó el comportamiento para λ fijo. Consideremos la misma familia de soluciones expresada en (4.22),

$$\psi(x, \lambda) = e^{ig_\lambda(x)} \quad (4.28)$$

tal que $\psi'(x, \lambda)$ queda como

$$\psi'(\lambda) = ig'_\lambda(x)e^{ig_\lambda(x)} \quad (4.29)$$

Donde $g_\lambda(x)$ sigue siendo real. En este caso consideramos a x fijo (por simplicidad en el punto a) y se varia λ en \mathbb{C} . Similarmente al caso del dominio de x , la definición de ψ y ψ' , ξ se expresa como $2\xi = g'_\lambda(x)$.

Como se expresa en el libro de Coddington y Levinson [69] las funciones φ y ψ son funciones enteras para $\Im(\lambda) \neq 0$ y reales para $\lambda \in \mathbb{R}$. Por tanto la función m es meromorfa para $\lambda \in \mathbb{C}$ y con polos simples en el eje real. Cada polo en la función m está asociado con un valor propio del problema singular de Sturm-Liouville. Es decir, los valores propios son reales y por tanto, las funciones φ y ψ son reales. Esto coincide con el hecho de que una condición para que ξ sea cero es que ψ y ψ' sean puramente reales.

A diferencia del comportamiento de la derivada de $g(x)$ cuando se fija λ y se varia x , al fijar x y variar λ no necesita ser estrictamente positiva o negativa. El comportamiento de $g_\lambda(a)$ al variar λ es el de una función con raíces simples y estas raíces son valores propios del problema singular de Sturm-Liouville. Es decir, $g'_\lambda(a)$ se comporta como una función oscilatoria que corta al eje real en puntos donde existen valores propios para el problema de Weyl.

Teorema 19 Sea $\psi(x) = e^{ig_\lambda(x)}$ una solución al problema definido por (4.1), (4.2), donde $g_\lambda(c)$ es una función compleja de λ y c es una constante en $[a, b]$. Entonces $g'_\lambda(c)$ es una función con ceros reales de orden uno. Mas aún, los ceros de $g'_\lambda(c)$ son valores propios del problema singular de Sturm-Liouville.

Prueba La demostración es inmediata y se apoya en el hecho de que la función m es una función meromorfa con polos reales, donde los polos corresponden con los puntos donde hay valores propios al problema singular de Sturm-Liouville. De (4.20) se sabe que los polos están determinados por $2\xi = g'_\lambda(c)$ por lo que las raíces de $g'_\lambda(c)$ son de orden 1 y corresponden con los valores propios de (4.1) y (4.2). ■

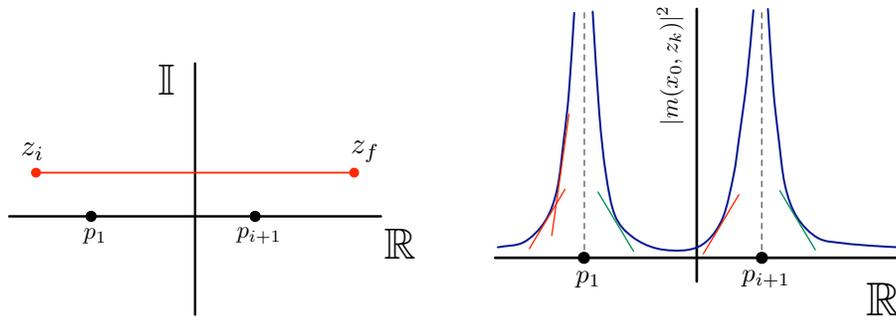


Figura 4.2: Recorrido en el intervalo \mathbb{I}_z

4.6 El espectro del operador diferencial de Sturm-Liouville a partir de la función m de Weyl-Titchmarsh

Las singularidades de la función $q(x)$ en la ecuación (4.1), así como de los intervalos finitos y semi-infinitos, se asocian a la aparición de espectros continuos. Una característica esencial en el trabajo de Weyl fue la asociación del espectro continuo al operador diferencial de Sturm-Liouville. En el caso del espectro discreto, los puntos del espectro dependen de las condiciones en la frontera. Sin embargo, el espectro continuo es independiente de las condiciones de la frontera.

Se puede encontrar el espectro para algunos problema determinados por (4.1) y (4.2) utilizando la función m de Weyl-Titchmarsh. En esta sección se discute el método numérico para obtenerlos.

Como se ha discutido, la función m de Weyl es una función entera con polos simples en el eje real. Esta propiedad de asociación de polo con valor propio es necesaria y suficiente cuando se trata de un espectro discreto al problema de Sturm-Liouville con condiciones en la frontera determinadas por (4.2) y en el caso de espectro continuo sólo es una propiedad necesaria pero no suficiente.

Geoméricamente, la estrategia del algoritmo es muy sencilla. Primero se establece un intervalo $\mathbb{I}_z = [z_i, z_f]$ sobre una línea recta en el plano complejo paralela al eje real, es decir $\Im(z_i) = \Im(z_f)$. Esta línea debe estar muy cerca del eje real, como se aprecia en la figura (4.2).

Después se genera una partición en el intervalo y se busca el comportamiento de la pendiente en el valor absoluto de la función m donde el dominio es el intervalo \mathbb{I}_z . Esto se describe en el algoritmo (1):

Algorithm 1 Espectro a partir de la función m de Weyl-Titchmarsh

Require: función m de Weyl-Titchmarsh, intervalo $\mathbb{I}_z = [z_i, z_f]$ tal que $\Im(z_i) = \Im(z_f) \neq 0$

- 1: Hacer una partición P de $k - 1$ subintervalos en el intervalo \mathbb{I}_z .
 - 2: $y_1 \leftarrow |m(0, z_1)|^2$
 - 3: $j \leftarrow 1$
 - 4: **for** $i = 2$ hasta k **do**
 - 5: $y_2 \leftarrow |m(0, z_i)|^2$
 - 6: **if** $s_1 \neq s_2$ **then**
 - 7: $a[j] \leftarrow (\Re(z_i) + \Re(z_{i-1}))/2$
 - 8: $j \leftarrow j + 1$
 - 9: **end if**
 - 10: $y_1 \leftarrow y_2$
 - 11: $s_1 \leftarrow s_2$
 - 12: **end for**
 - 13: regresar A
-

El error en la aproximación depende totalmente del tamaño de la partición de \mathbb{I}_z , debido a que la magnitud del punto del espectro al punto aproximado p' siempre es menor que la mitad del intervalo de la partición, esto es

$$error = |p - p'| < \frac{|z_{i+1} - z_i|}{2} = (\Re(z_i) - \Re(z_{i-1}))/2 \quad (4.30)$$

como se aprecia en la figura (4.3)

4.7 La función de densidad espectral ρ

Un aspecto principal en el problema singular de Sturm-Liouville es la incorporación de la función de densidad espectral. Su uso se refiere principalmente al hecho al concepto de espacio medible para el espacio de funciones. Esto es la función ρ es inherente al espacio de Hilbert de funciones cuadráticamente integrable $\mathcal{L}^2((a, b), \rho)$. Este hecho se refleja en el siguiente teorema.

Teorema 20 Sea $f(x) \in \mathcal{L}^2(0, \infty)$. Existe una función monótona creciente $\rho(\lambda)$ que no depende de $f(x)$ y una función $F(\lambda)$ (la transformación de Fourier generalizada de $f(x)$) tal que

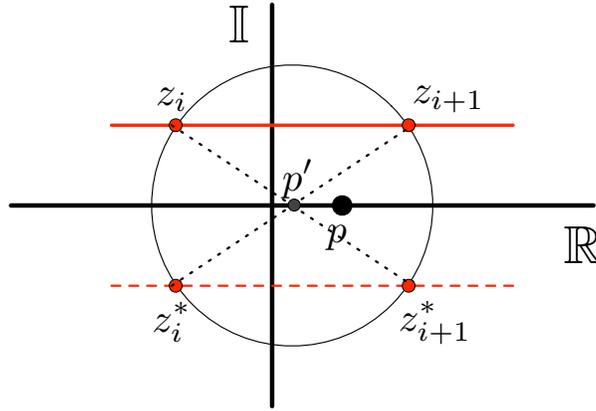


Figura 4.3: Aproximación del polo de la función m de Weyl-Titchmarsh

se tiene la igualdad

$$\int_0^\infty f^2(x)dx = \int_{-\infty}^\infty F^2(\lambda)d\rho(\lambda) \quad (4.31)$$

A pesar de ser un referente para la teoría de operadores con espectros continuos, existen pocos trabajos relacionados con la computación de la función de densidad espectral [76]. Aunque aun existe el problema de precisión cuando se considera que el punto inicial a del intervalo es singular.

La función de densidad espectral ρ se puede obtener a partir de una aproximación del problema regular cuando se tiene el caso en que el intervalo de integración $[a, b]$ es finito y $q(x)$ presenta un discontinuidad en uno de los puntos de la frontera.

En el caso de tener un problema regular, se sabe que su espectro es discreto. Una parte importante que se ha mencionado en la sección anterior es que podemos construir una función m para los problemas regulares y el espectro se presenta como polos simples en la función meromorfa m , hecho que se aprovecha en el algoritmo (1). Para el caso de espectro regular, la función de densidad espectral se presenta como una función escalón

Las discontinuidades de magnitud $|\gamma_k|^2$ en los puntos λ_k correspondientes, inducen una función de peso $\sigma(\lambda)$ dando como resultado la gráfica 4.4.

Para el caso de un intervalo infinito nuestra igualdad de Parseval toma una aproximación a una integral de Stieltjes.

$$\frac{m - m^*}{\lambda - \lambda^*} = \int_{-\infty}^\infty \frac{d\rho(\mu)}{|\lambda - \mu|^2} \quad (4.32)$$

La función $\rho(\mu)$ deberá ser llamada la función de distribución espectral, la cual es aproximada por una función de escalera, cuyo incremento en el valor propio λ_i es γ_i , como se puede observar en la figura 4.4. Esto es, se pretende que la función escalera tienda a una función monótona no decreciente $\rho(\mu)$ cuando $b \rightarrow \infty$.

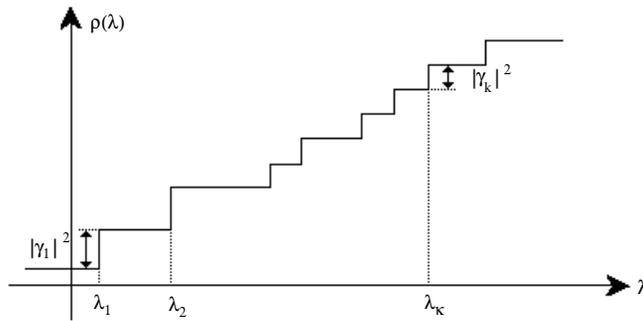


Figura 4.4: Función de densidad espectral ρ

Si nosotros quisiéramos hablar en términos un poco más precisos desde el punto de vista de teoría de integración, tendríamos que considerar medidas del tipo Lebesgue-Stieltjes ($\mathcal{L}^2(\rho)$ cuando ρ es una función monotona no decreciente definida en $-\infty < \lambda < \infty$), y el objetivo es realizar la computación de dicha función.

Para el caso del punto límite se sabe que existe una relación entre la función $m(x, \lambda)$ y la función de densidad espectral ρ (Teorema 3.1, capítulo nueve [69]), de tal forma que se puede obtener a la función ρ integrando la parte imaginaria de m como se muestra en la siguiente expresión:

$$\rho(\lambda) = \rho(a) + \frac{1}{\pi} \int_a^\lambda \Im(m(b, w + iv)) dw \quad (4.33)$$

Así podemos encontrar la función de densidad espectral asociado a un problema singular de Sturm-Liouville.

4.8 Conclusiones

El problema regular de Sturm-Liouville está asociado a espectros continuos, mientras que el problema singular se asocia a espectros discretos. Mas aún, la elección de condiciones en la frontera incide en la distribución del espectro discreto, mientras que esto no afecta al espectro continuo.

El teorema de mapeo de semiplano nos permite tener una visión más geométrica del comportamiento de la función m de Weyl-Titchmarsh, ya que las propiedades del mapeo del eje real nos permiten incidir en el comportamiento de las soluciones que forman a dicha función.

Al proponer una familia de soluciones de la forma $\psi = e^{ig\lambda(x)}$ para el problema singular de Sturm-Liouville, se busca tener un tipo de soluciones con mejor aproximación de las que actualmente se realizan, por ejemplo en [77][15].

La derivada de la función de densidad espectral se puede ver como una función de densidad de probabilidad para los elementos del espectro (es decir la función de

densidad espectral es una función de distribución de probabilidad asociada espectro). Esto nos permite obtener regiones de espectro continuo y poder determinar los puntos del espectro a partir de las discontinuidades de $\rho(\lambda)$.

La función m también se asocia al conjunto de funciones Nevanlinnas, donde una función Nenevalinna es aquella que es analítica en el semiplano superior complejo y tiene una parte imaginaria no negativa. Este hecho indica que para formar la función de densidad espectral se debe considerar a un número complejo (en el espacio de valores propios) λ con $\Im(\lambda) > 0$ para el problema singular de Sturm-Liouville. En caso de que $\Im(\lambda) < 0$ tendremos que la función ρ construida a partir de la ecuación (4.33) es monotonamente no creciente.

Capítulo 5

Casos de estudio

El estudio de la función m de Weyl-Titchmarsh nos ha permitido revisar las propiedades de las soluciones y su relación con el espectro de los sistemas representados con operadores diferenciales de Sturm-Liouville.

Las expresiones de las ecuaciones de Schrödinger (2.19) y Dirac (2.28), tienen la forma conveniente de incluir el valor de energía. Lo cual, sugiere que el espectro se debe calcular antes de realizar estas computaciones y, con estas ecuaciones diferenciales podemos obtener las soluciones de cada nivel de energía.

Las soluciones base de los sistemas pueden obtenerse numéricamente con los métodos de Runge-Kutta si el sistema sólo requiere de condiciones iniciales. Generalmente, las soluciones de la ecuación de Schrödinger, ecuación (2.19), y de Dirac, ecuación (2.28), involucran las condiciones iniciales $Z(x_0)$ y $\Psi(x_0)$. Si se eligen a estos estados iniciales como matrices unitarias, entonces las funciones solución que se calculan se les denominan soluciones fundamentales, y son bastante útiles en caso de que se requiera obtener soluciones con valores a la frontera utilizando métodos numéricos basados en diferencias finitas [54].

5.1 Partícula libre de Schrödinger

El caso más simple de analizar es el de la partícula libre. El potencial de la partícula libre corresponde a $V(x) = 0$. Este caso se presenta en libros de texto de mecánica cuántica, aquí presentaremos la evolución del sistema que se produce por el efecto de la discretización y que ya se ha discutido en la sección 2.5.4. También mostramos un tratamiento de este problema desde el punto de vista del problema singular de Sturm-Liouville al considerar que el intervalo del problema es semi-infinito, esto es $[0, \infty)$, por lo que se dará su función m de Weyl-Titchmarsh y su función de densidad espectral.

Si consideramos a $\hbar = 1$ y $m = 1$, entonces la ecuación de Schrödinger para este caso

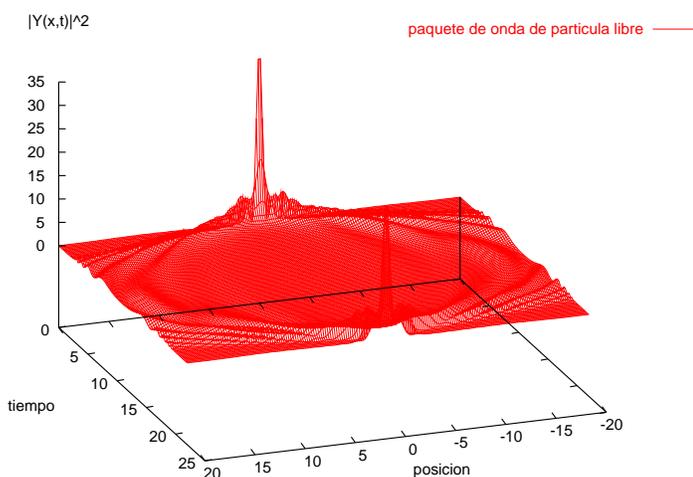


Figura 5.1: Evolución del paquete de onda de la partícula libre de Schrödinger con superposición de soluciones estacionarias

queda como

$$-\frac{1}{2} \frac{d}{dx^2} \psi = \lambda \psi \quad (5.1)$$

y considerando el problema de valores propios, podemos tener la representación matricial como sigue

$$\frac{d\mathbf{Z}(x)}{dx} = \begin{pmatrix} 0 & -E \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{Z}(x). \quad (5.2)$$

Es conocido que la solución independiente del tiempo de esta ecuación diferencial queda como [13][78]:

$$u(x, \lambda) = e^{i\sqrt{\lambda}x} \quad (5.3)$$

Se sabe que el espectro de la partícula libre es continuo en un intervalo semi-infinito $\mathbb{E} = \{E | E > 0\}$. Como se ha comentado en el capítulo 2, construir el paquete de ondas a partir de soluciones estacionarias en un espectro continuo genera un problema de aparición de ciclos inducidos por el proceso de discretización, como se ha discutido en la subsección 2.6.3. La evolución del paquete de onda haciendo la superposición de soluciones estacionarias, se presenta en la figura (5.1). Esta figura es representativa del comportamiento cíclico inducido por el proceso de discretización. La evolución de esta gráfica se obtiene al discretizar la región $[0, 20]$ del espectro haciendo una partición de

70 puntos. Por la ecuación (2.56), podemos establecer que este ciclo queda en:

$$t_c = \frac{2\pi}{20}(70 - 1) \approx 21.991$$

como se puede apreciar en la figura (5.1).

Ahora usaremos el enfoque de la teoría de Weyl para trabajar con este problema. Debido a que en la ecuación (5.1) $q(x) = 0, \forall x \in [0, \infty)$ y como $0 = q(x) \geq -x^2$, por el corolario 17, con $k = 1$, se tiene que este sistema cae en el caso círculo límite al infinito.

Parece obvio elegir a $u(x, \lambda) = e^{\sqrt{\lambda}x}$ como la función ψ para construir la función m de Weyl-Titchmarsh. Sin embargo, debe notarse que difícilmente esta solución cumple con las condiciones iniciales del problema singular (4.8), y además se tendría que la función $g(x, \lambda) = \sqrt{\lambda}x$ y $\frac{d}{dx}g(x, \lambda) = \sqrt{\lambda}$, y no se cumple que:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} g'(x, \lambda) = \infty.$$

como se establece en la sección 4.5.1.

Por esta razón, si consideremos las condiciones en la frontera (4.8), entonces $\psi = \cos \alpha$ y $\psi' = -\text{sen } \alpha$, donde $\alpha \in \mathbb{C}$. Entonces ξ queda como:

$$\begin{aligned} \xi &= \Re(\psi)\Im(\psi') - \Im(\psi)\Re(\psi') \\ &= -\Re(\cos \alpha)\Im(\sin \alpha) + \Im(\cos \alpha)\Re(\sin \alpha) \\ &= \cosh \Im(\alpha)\sinh \Re(\alpha) \cos^2 \alpha + \cosh \Re(\alpha)\sinh \Im(\alpha) \text{sen}^2 \alpha \\ &= \cosh \Im(\alpha)\sinh \Re(\alpha) (\cos^2 \alpha + \text{sen}^2 \alpha) \\ &= 2\sinh 2\Im(\alpha) \end{aligned} \tag{5.4}$$

Si utilizamos las funciones ψ, ψ', φ y φ' de la ecuación (2.20), tenemos que $\alpha = \sqrt{\lambda}x$. El valor α es complejo porque $\lambda \in \mathbb{C}$ y $x \in \mathbb{R}$. Entonces, como $\frac{d}{dx}g(x, \lambda) = 2\xi$, tenemos:

$$\frac{d}{dx}g(x, \lambda) = 4\sinh \left(2\Im \left(\sqrt{\lambda} \right) x \right) \tag{5.5}$$

El radio del círculo de Weyl lo podemos expresar como la inversa de $\frac{d}{dx}g(x, \lambda)$, esto es, el radio del círculo de Weyl para la partícula libre queda como

$$R = \frac{1}{4\sinh \left(2\Im \left(\sqrt{\lambda} \right) x \right)}, \tag{5.6}$$

lo cual tiene sentido, ya que se ha comentado que la función m es meromorfa en el espacio de λ , con polos en el eje real. Así, es fácil ver que el radio del círculo se va a infinito cuando $\lambda \in \mathbb{R}$ y que el radio tiende a cero conforme $b \rightarrow \infty$ con $\Im(\lambda) \neq 0$.

Así, la función ψ queda de la forma:

$$\psi = e^{ig(x, \lambda)} = e^{i4 \cosh(2\Im(\sqrt{\lambda})x)}.$$

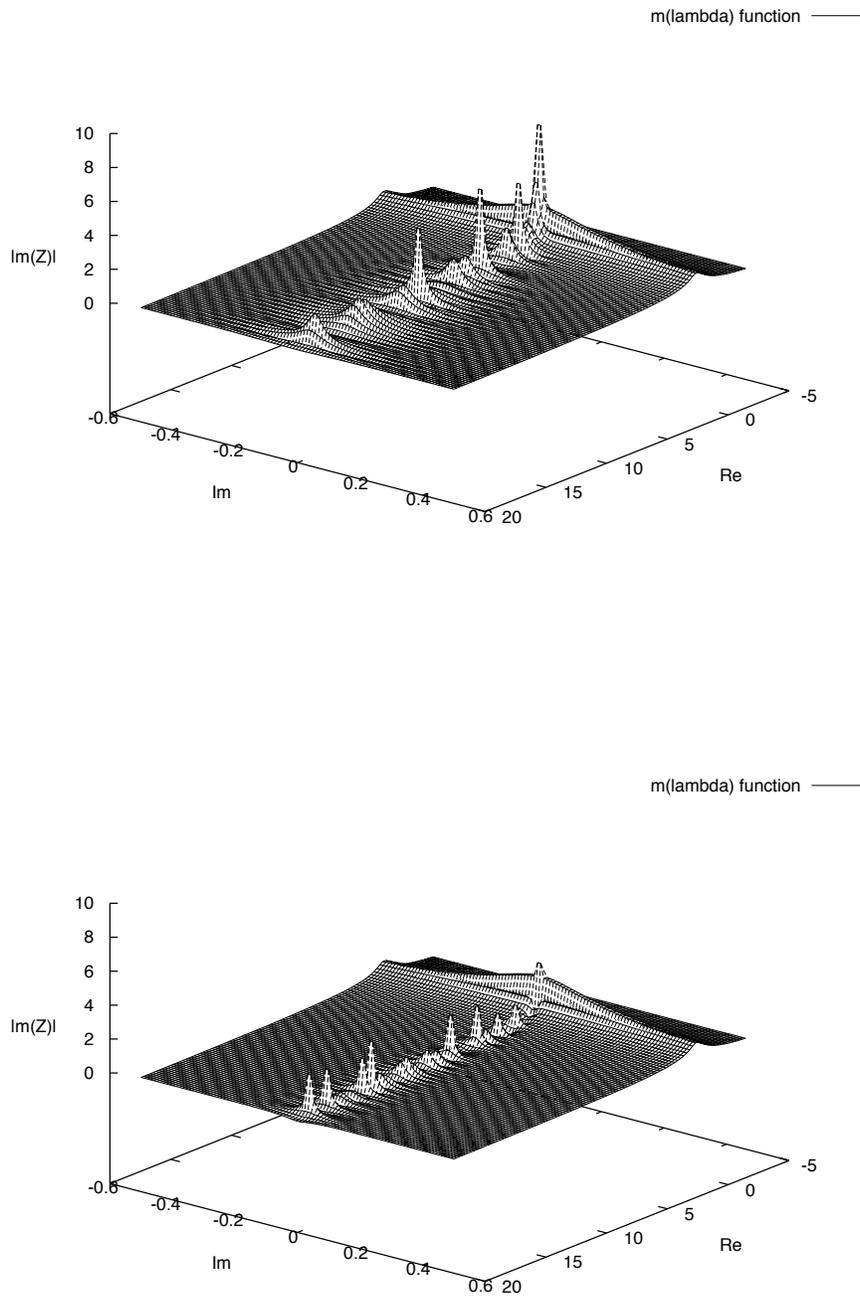


Figura 5.2: Aproximaciones de la función m de Weyl para $b = 50$ y $b = 130$.

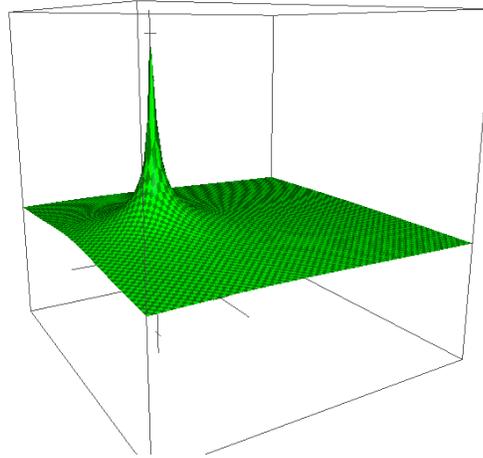


Figura 5.3: Función m propuesta por Titchmarsh para el caso de la partícula libre no relativista

Sabemos que para el caso de punto límite la función m se puede expresar como:

$$m = \frac{\varphi(x, \lambda)}{\psi(x, \lambda)} \quad (5.7)$$

Ejemplos de estas gráficas se muestran en la figura (5.2), para distintos valores de b .

Comparemos esta solución aproximada con la solución analítica. La función m para el caso de la partícula libre de Schrödinger ha sido calculada por Titchmarsh [74],

$$m(\lambda) = \frac{i}{\sqrt{\lambda}}.$$

y se presenta en la gráfica (5.3). Es claro que la función m tiene un polo en el eje real para $\lambda = 0$.

Se ha discutido que la función m establece una relación entre un par de soluciones al problema de Sturm-Liouville con el espectro del sistema mediante la función de densidad espectral ρ . La función de densidad espectral ρ y la función ρ' , función de densidad de probabilidad espectral, se muestran en la figura (5.4).

Entonces podemos hacer la superposición de las soluciones $\psi(x, \lambda)$ para construir el paquete de ondas de la siguiente manera

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty a(k) e^{i\sqrt{k}x} d\rho(k). \quad (5.8)$$

La función de densidad espectral $\rho(\lambda)$ que se obtiene de la función m calculada por Titchmarsh se muestra en la figura (5.4). La función ρ que se obtiene de la función m

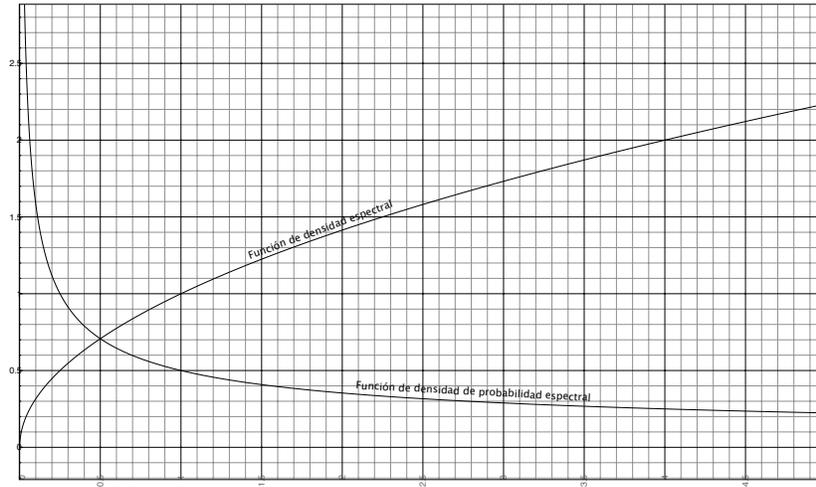


Figura 5.4: Función ρ y ρ'

con la familia de soluciones propuesta, ecuación (5.7), se presenta en la figura (5.5). La aproximación de la función escalón $\rho_b(\lambda)$ depende de valor b que se seleccione. La figura (5.4), presenta la aproximación de $\rho(\lambda)$ para $b = 130$.

Finalmente, la figura (5.6) presenta la evolución de la partícula libre de Schrödinger. El paquete de ondas se ha construido como una integral de Stieltjes, ecuación (5.8). Se observa claramente que el paquete de onda se parte en dos, como es bien conocido [34][78].

5.2 Partícula libre de Dirac

Como en el caso de la partícula libre relativista, la partícula libre de Dirac se ha discutido en varios libros de texto y se presenta como un primer ejemplo para los casos relativistas. Sin embargo, aún el fenómeno del Zitterbewegung que aparece en este sistema no ha sido explicado con toda claridad.

El operador de energía que postuló Dirac para la partícula libre tiene la forma

$$H = \alpha \cdot \mathbf{p} + \beta m, \quad (5.9)$$

donde α es una de las matrices de Dirac, dadas en la ecuación (2.26) y β es la matriz unitaria. Entonces

$$\hbar \frac{dx}{dt}(t) = i[H, x] = \alpha$$

Eso indica que la velocidad de la partícula libre está asociada a un operador con valores propios 1 y -1. Si se trabaja con un espacio de mas dimensiones, se tienen distintos α para cada componente de la velocidad y además estos componentes no conmutan.

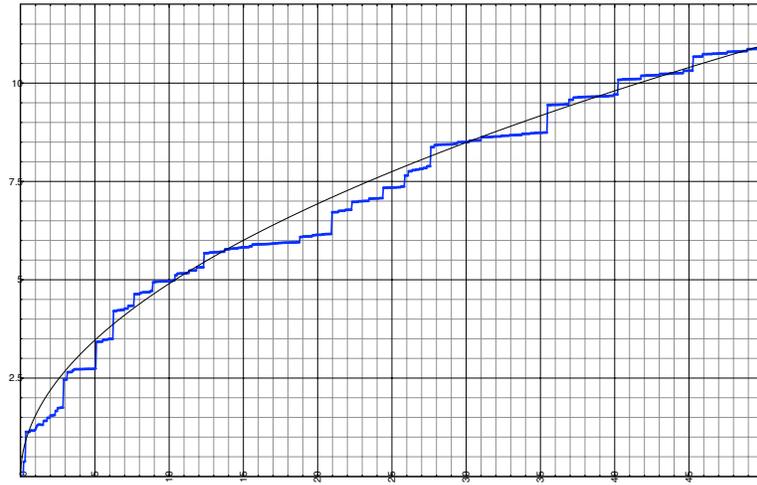


Figura 5.5: Comparación de las funciones ρ obtenidas a partir de la función m propuesta por Titchmarsh y la calculada numéricamente.

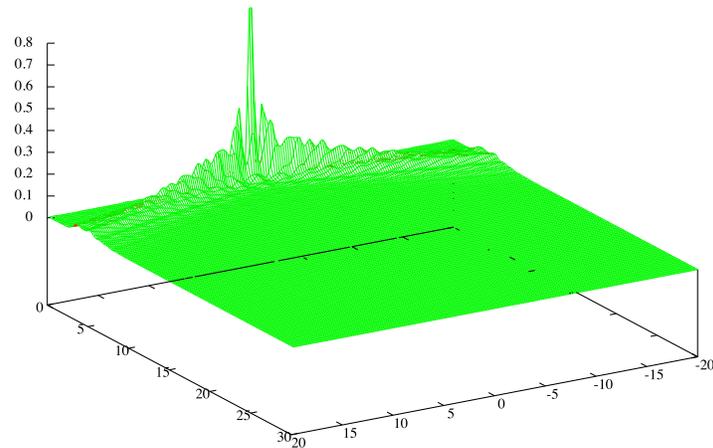


Figura 5.6: Evolución del paquete de ondas de la partícula libre como integral de Stieltjes.

Esto, para los físicos, genera diversas dificultades como el hecho de que estos valores propios sugieren que la partícula puede ir a la velocidad de la luz y se esperaría que los componentes de la velocidad estuviesen en el intervalo $[-1, 1]$ [11]. Esta anomalía en el operador de velocidad fue notada inicialmente por Breit y Schrödinger, quien obtuvo la expresión

$$x(t) = x(0) + c^2 p H^{-1} t + \frac{1}{2} i \hbar c H^{-1} (\alpha(0) - c p H^{-1}) (e^{2iHt/\hbar} - 1)$$

El operador de posición consiste de la suma de una posición inicial, un desplazamiento que es proporcional al tiempo y un último término, el cual representa una oscilación violenta de la partícula alrededor del valor esperado de la posición.

De manera similar al caso no relativista, los espinores solución de la partícula libre de Dirac (5.10), no pertenecen al espacio de Hilbert de las soluciones cuadráticamente integrables.

$$\begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \left(x \sqrt{m_0^2 - E^2} \right) \\ \left(\frac{m_0 - E}{m_0 + E} \right)^{1/2} \sinh \left(x \sqrt{m_0^2 - E^2} \right) \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

El espectro de este sistema queda como

$$\mathbb{E} = \{e : |m_0| < e\}. \quad (5.11)$$

Entonces el paquete de ondas se contruye con la suma de las superposiciones de los elementos de los espinores propios, como se discute en la sección 2.4.4. Así, como en la ecuación (2.34) la expresión del paquete de ondas de la partícula libre queda como

$$\int_{\mathbb{E}} (|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2) dx.$$

El Zitterbewegung debe su existencia a la interferencia entre los estados de energía positivos y negativos. El comportamiento del Zitterbewegung se aprecia en la evolución del paquete de onda de la partícula libre de Dirac. Este paquete de ondas es la superposición de las funciones de onda que corresponden a las energías positivas y negativas que tiene este sistema. En la evolución de las soluciones negativas y positivas se puede observar que tienen la misma velocidad, pero en sentido opuesto, tal y como se deduce de los valores propios del operador de velocidad.

El paquete de ondas se contruye con la suma de las superposiciones de los elementos del espinor solución, como se discute en la sección 2.4.4.

$$\int (|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2) dx = \int |\psi_1(x)|^2 dx + \int |\psi_2(x)|^2 dx < \infty.$$

Los valores de los coeficientes de Fourier dependen del estado inicial $\psi(x, 0)$ dado en (2.51)

$$\psi(x, 0) = e^{-(x-x_0)/2\sigma^2} e^{-ik_0 x},$$

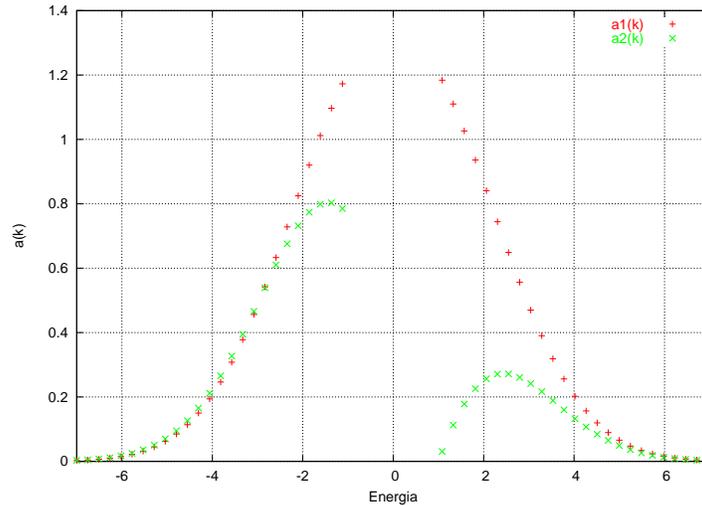


Figura 5.7: Coeficientes a_k para la partícula libre relativista

donde k_0 es el promedio de la energía y σ representa la desviación estandar de x . Si consideramos que el valor de la masa en reposo es $m_0 = 1$, y el estado inicial del sistema con los valores para $\sigma = 1/\sqrt{\pi}$ y $k_0 = 0.2$, entonces podemos graficar los coeficientes de Fourier para la partícula libre de Dirac con el estado inicial $\psi(x, 0)$, como se muestra en la figura (5.7). En dicha gráfica podemos apreciar que podemos cambiar los rangos de energía asociados al espectro de la partícula libre relativista de los rangos $(-\infty, -1]$ y $[1, \infty)$, a los rangos $(-7, -1]$ y $[1, 7)$, respectivamente.

El valor del promedio del momento k_0 repercute directamente en el grado de participación del segundo elemento del espinor, $\psi_2(x)$, de la solución. Si el valor $k_0 = 0$ los coeficientes de Fourier asociados al segundo elemento del espinor son cero, lo que indica que los valores del primer elemento del espinor son los únicos que contribuyen en la construcción del paquete de onda.

Por último, para discretizar el espectro continuo se toma una partición del rango de energías correspondientes. La forma de discretizar el espectro tendrá una repercusión directa sobre la evolución en el tiempo del paquete de onda, como se ha explicado en la sección 2.6.3. En general, la distribución de los coeficientes de Fourier respeta el principio de incertidumbre de Heisenberg, pues para valores de σ grandes, los coeficientes de Fourier se hacen cero excepto en vecindades alrededor de $\pm k_0$.

Algunos trabajos que discuten el comportamiento del Zitterbewegung contemplan sólo la superposición del primer componente del espinor, esto equivale a tener un sistema con promedio de energía cero. Sin embargo, no hay razón para la cual no incluir ambos componentes del espinor. La evolución de este sistema depende mucho del estado inicial. En general, el sistema parte en dos como en el caso de Schrödinger pero

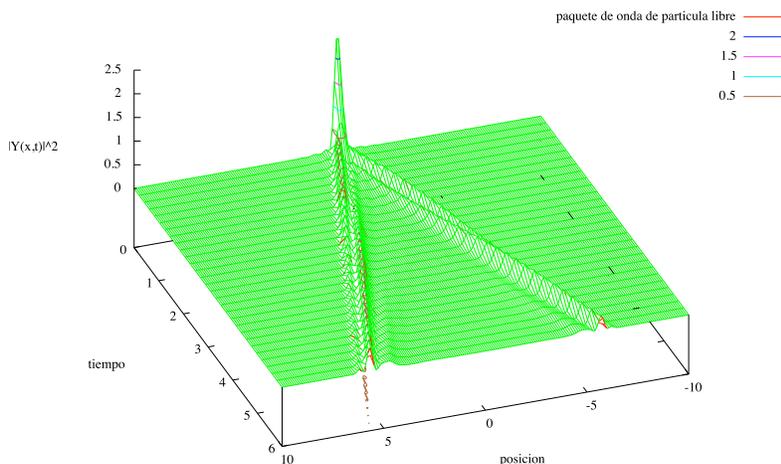


Figura 5.8: Partícula libre de Dirac con un estado inicial con σ pequeño.

no siempre de manera simétrica. Para valores pequeños de σ , el sistema si se parece al caso de Schrödinger donde se parte en dos y de una manera simétrica, como se observa en la figura (5.9).

Un caso particularmente interesante es cuando σ es mayor al promedio de la energía k_0 y la masa en reposo es mayor a k_0 . En este caso el sistema casi siempre se mantiene en dos partes, pero no viajan en direcciones opuestas, sino que se mantienen en un movimiento Zitterwebeung alrededor de 2σ .

5.3 Pozo infinito

Uno de los problemas más sencillos en mecánica cuántica es el pozo infinito de potencial. La mayoría de los libros de texto tienen este ejemplo, pues su solución presenta un espectro discreto y sus soluciones son cuadráticamente integrables. Este problema es resuelto en la mayoría de los libros de texto de mecánica cuántica, ver por ejemplo [78]. Por esta razón, lo hemos tomado como ejemplo para verificar el mecanismo numérico para construir un paquete de ondas como una integral de Stieltjes en un problema donde se sabe que las soluciones corresponden a un espectro puramente discreto. Así, el objetivo principal en esta sección es presentar el estudio numérico de la construcción de paquetes de onda como integrales de Riemann, al que denominamos paquete de onda clásico, y de los paquetes de onda construidos utilizando el enfoque de integrales de Stieltjes.

El problema del pozo infinito de potencial en una dimensión se presenta como en la figura (5.10), donde se asume que el potencial es infinito fuera de la región $[-a, a]$ y cero

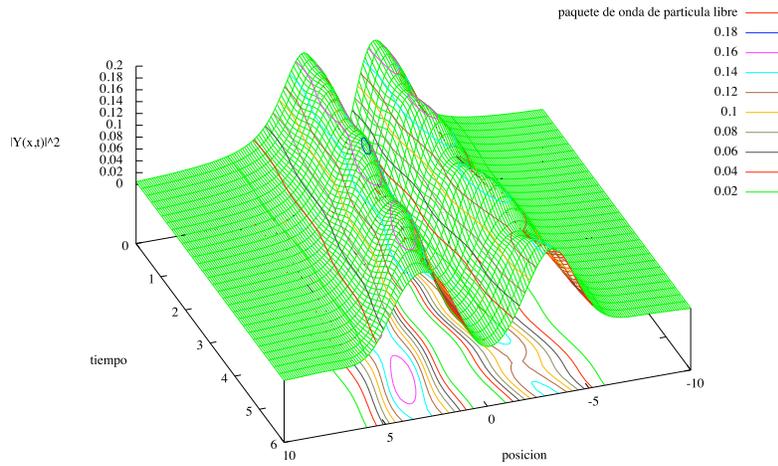


Figura 5.9: Partícula libre de Dirac con un estado inicial con $\sigma > k_0$.

en esta región. Este potencial indica que las partículas dentro de la región $[-a, a]$ están atrapadas y no pueden salir, así que la probabilidad de encontrarlas en esta región es 1.

El potencial entonces se describe como

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \in (-a, a) \\ \infty & \text{en otro caso} \end{cases} \tag{5.12}$$

Y la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para este problema, se presenta como

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{5.13}$$

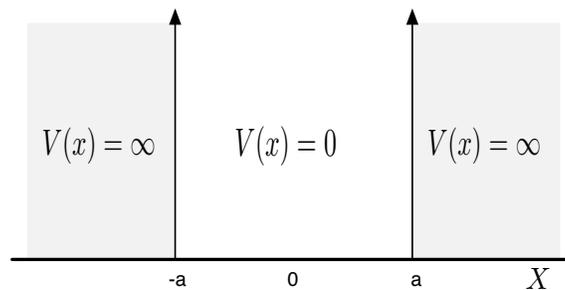


Figura 5.10: Potencial del pozo infinito

Las soluciones a este problemas se plantean de forma tal que sean cero en las regiones donde el potencial es infinito, debido a que se considera que es cero la probabilidad de encontrar a una partícula en esta región. Se considera también que las soluciones ψ sean cero en los puntos a y $-a$, de la figura (5.10), es decir que $\psi(-a) = \psi(a) = 0$.

Las soluciones a este problema se presentan como soluciones pares ψ_e y soluciones impares ψ_o y son

$$\psi(x)_e = \text{sen}(kx) \quad (5.14)$$

$$\psi(x)_o = \text{cos}(kx) \quad (5.15)$$

donde $k = \sqrt{\frac{2m_0E}{\hbar^2}}$.

Para que estas soluciones cumplan con las condiciones en la frontera que se han impuesto, los valores de las energía para las soluciones pares e impares quedan como

$$E = \left(\frac{2i+1}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_0a^2}, \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (5.16)$$

$$E = \frac{i^2\hbar^2\pi^2}{2m_0a^2}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (5.17)$$

tal que las energías están ordenadas como sigue:

$$E = \left\{ \frac{\hbar^2\pi^2}{8m_0a^2}, \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_0a^2}, \frac{9\hbar^2\pi^2}{8m_0a^2}, \frac{2\hbar^2\pi^2}{m_0a^2}, \dots \right\}$$

es decir, una secuencia de energía impar y energía par. Finalmente se puede notar que las energías están en función del valor de a que se especifica originalmente en el potencial, ecuación (5.12).

Por fines de simulación consideraremos $\hbar = 1$. Las cuatro primeras soluciones de este problema se muestran en la figura (5.11).

Volviendo al caso del potencial de pozo infinito, conocemos el espectro, ecuaciones (5.16) y (5.17) y las soluciones de las ecuaciones (5.14) y (5.15). Si se considera el estado inicial (2.51) y el caso en que $a = 1$ y los valores del estado inicial son $k_0 = 0.2$, $\sigma = 0.25$ y $x_0 = 0$, podemos obtener los coeficientes de Fourier a_n , como se muestra en la figura (5.12). Se puede apreciar que los coeficientes a_n , para estos valores, tienden a cero para los valores de energía mayores a 99.929745. También se puede observar la presencia de dos tendencias en el comportamiento de los coeficientes de Fourier, debido principalmente a que hay un grupo de coeficientes generados por las funciones de las soluciones pares (5.14) y otro por las funciones de las soluciones impares (5.15). Esto se refleja en el comportamiento intercalado de los coeficientes; los coeficientes impares mantienen la secuencia descendente $\{0.579544, 0.313217, \dots\}$, más abrupta que la secuencia de los coeficientes pares, que se comporta como $\{0.018061, 0.014327, \dots\}$.

El comportamiento de estos coeficientes muestra cuales son las soluciones que contribuyen a la formación del paquete de ondas. Para el ejemplo que estamos mostrando,

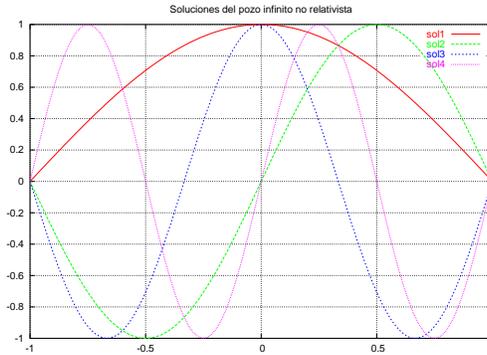


Figura 5.11: Soluciones del pozo cuadrado para $a = 1$

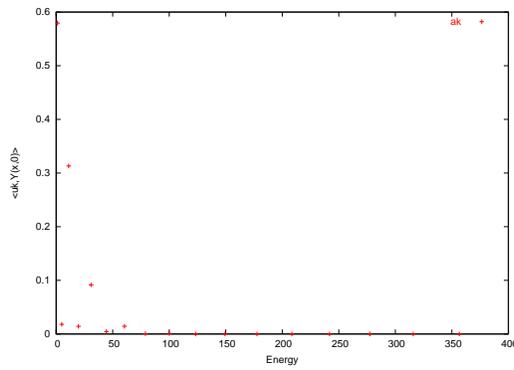


Figura 5.12: Valores de los coeficientes a_n , para el caso en que $a = 1$, y los valores del estado inicial $\psi(x, 0)$ son $k_0 = 0.2$, $\sigma = 0.25$ y $x_0 = 0$.

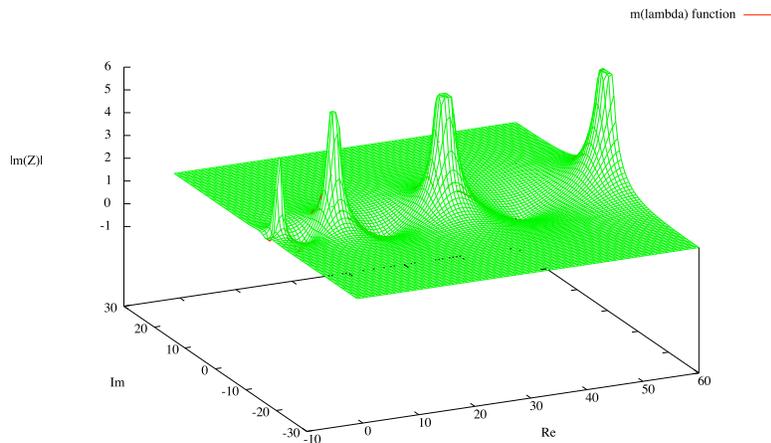


Figura 5.13: Función m para el caso del pozo infinito.

se puede apreciar que, aproximadamente, las primeras ocho soluciones son las que contribuyen a la forma del paquete de ondas, las demás soluciones pueden ser despreciadas si su respectivo coeficiente de Fourier es demasiado pequeño.

Construir la función m de Weyl-Titchmarsh para este sistema es fácil, una vez que se ha realizado la computación para el caso de la partícula libre. En este caso, sólo se debe considerar un intervalo finito en el dominio de x . La gráfica de esta función se muestra en la figura (5.13).

La función de densidad espectral para este sistema se puede apreciar en la figura (5.14), se puede apreciar que los saltos en la función se realizan en los valores donde hay puntos del espectro.

La evolución del paquete de ondas se muestra en la figura (5.15) para los intervalos de tiempo $[0, 0.67]$ y $[0, 0.5]$. En el primer caso se aprecia la aparición de ciclos aproximadamente en $t \approx 0.67$. En la segunda gráfica de (5.15), se aprecia que la distribución de probabilidad se mantiene uniforme conforme el tiempo transcurre.

Sin embargo, no podemos decir que este sea el comportamiento general, ya que si en el estado inicial se selección un valor $x_0 \neq 0$, entonces obtenemos un comportamiento un poco más “caótico”, como se puede apreciar en la figura (5.16)

5.3.1 La función espectral ρ

Si $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots\}$ son los valores propios de un operador diferencial, y $\{u_1, u_2, \dots\}$ sus respectivas funciones propias. Entonces, la función espectral ρ es una función monótona no decreciente en el intervalo donde están definidos los valores propios. Cuando existe un espectro discreto, la función espectral es una función escalón sobre los valores del

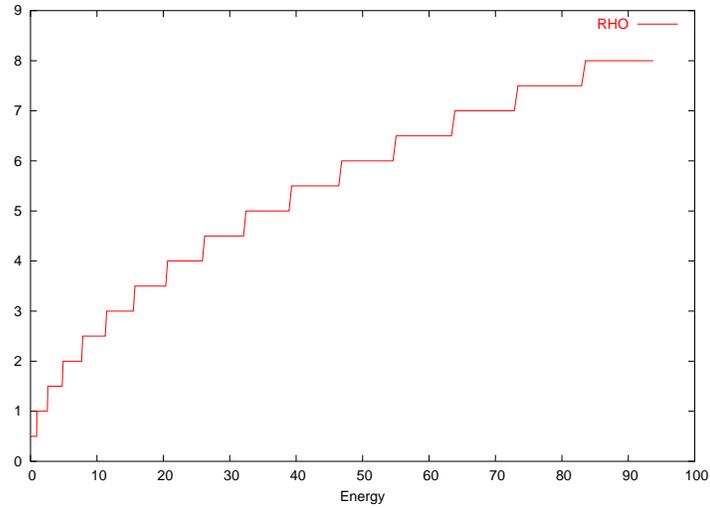


Figura 5.14: Función de densidad espectral ρ para el pozo infinito de potencial.

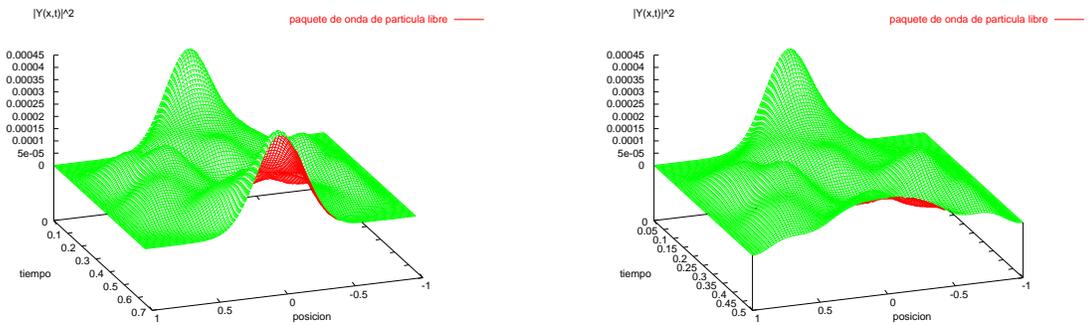


Figura 5.15: Evolución del paquete de ondas del pozo infinito no relativista para lapsos de tiempo $[0, 0.67]$ y $[0, 0.5]$

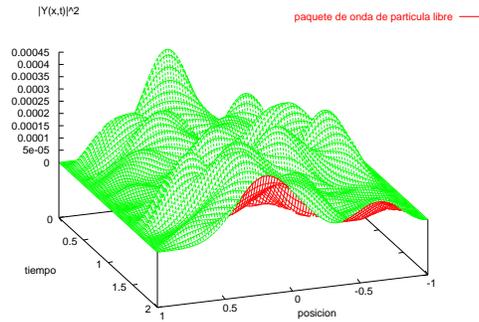


Figura 5.16: Evolución del paquete de ondas del pozo infinito no relativista cuando $x_0 = 0.2$.

Figura 5.17: Función m para el caso del pozo infinito no relativista

espectro. La función espectral presenta discontinuidades en los valores propios λ_i , y el tamaño del escalón es $\gamma_i = \langle u_i | u_i \rangle^{-1}$.

5.4 Conclusiones

En los ejemplos mostrados para los casos de sistemas con espectros continuos y espectros discretos; simplemente corroboran el hecho de que para el caso de espectros discretos, los valores del espectro dependen de las condiciones de la frontera que se tengan.

Para el caso del espectro continuo, se establece que el rango no varía, sin embargo podemos notar que la función de densidad espectral tiene cambios, no en los límites del rango del espectro, pero sí en la derivada de ρ , que es la función de densidad de probabilidad del espectro. Es decir, las regiones cambian de densidad dependiendo de las condiciones en la frontera que se tengan. Esto se ha hecho evidente en las comparaciones de los potenciales de pozo infinito y de partícula libre, cuando el intervalo del pozo infinito se fija al rango $[0, b]$ y cuando $b \rightarrow \infty$; en la figura (5.18) se muestra la función de densidad espectral ρ para $b = 130$.

La derivada de la función ρ establece entonces que aunque se tenga un espectro continuo, en este caso de $[0, \infty)$, la mayor probabilidad de estar en unos de los estados de baja energía, como se puede apreciar en la figura (5.4).

En relación al Zitterbewegung, los trabajos de simulación se han centrado en la si-

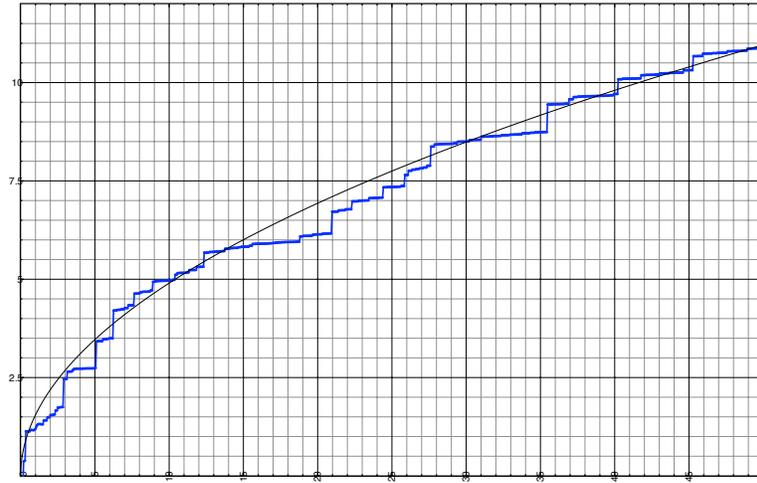


Figura 5.18: Aproximación de la función de densidad espectral ρ de la partícula libre mediante funciones de densidad espectrales conforme $b \rightarrow \infty$.

mulación del paquete de onda considerando únicamente la superposición del primer componente del espinor y no existe un razón alguna para no considerar ambos componentes. En las simulaciones que hemos realizado hemos observado que el estado inicial gaussiano nos indica distintos comportamientos del paquete de onda, aunque en todos los casos se mantiene el comportamiento de oscilación violenta propio del Zitterbewegung. Particularmente, las simulaciones de Zitterbewegung que sólo tratan con la parte superior del espinor equivalen a decir que el parámetro k_0 del estado gaussiano inicial, implica que el promedio de la energía es cero. El comportamiento de las superposiciones de los componentes del espinor son antisimétricos con respecto a las energías positivas y negativas. Esto quiere decir que la evolución del primer componente del espinor para energías positivas se mueve en la dirección opuesta a la evolución del segundo componente del espinor para energías negativas.

Capítulo 6

Discusión, resultados y conclusiones

6.1 Discusión

Aunque el objetivo principal de este trabajo es la simulación de paquetes de onda utilizando el enfoque de integral de Stieltjes, hemos incidido un poco en áreas de variable compleja en el estudio de la transformación de Möbius y de la función m de Weyl, en los capítulos 3 y 4 respectivamente.

Referente a la simulación de paquetes de onda, se realizaron experimentos numéricos con el enfoque de integrales de Riemann para construir paquetes de ondas en casos donde los sistemas tienen espectro continuo, ver secciones 2.6 y 5.1. Estas simulaciones se hicieron con el objetivo de estudiar el efecto de la discretización del espectro en la evolución del paquete de ondas. El resultado fue la identificación de períodos que son inducidos por este proceso de discretización y no forman parte del comportamiento dinámico del sistema real. Este comportamiento anómalo del sistema se presenta tanto en la simulación de paquetes de onda para la ecuación de Schrödinger como para la ecuación de Dirac.

Se comparó el comportamiento de los paquetes de ondas para sistemas con espectro discreto en simulaciones que utilizan el enfoque de integral de Riemann y de integral de Stieltjes, sección 5.3. El sistema que se simuló fue el del potencial de pozo infinito. El resultado de esta comparación nos permitió confirmar que las propiedades cualitativas en el comportamiento del paquete de ondas no varía si se utiliza un enfoque de integral de Riemann o de Stieltjes.

Al trabajar con el enfoque de soluciones estacionarias en la construcción de paquetes de onda, podemos elegir los rangos del espectro que deseamos utilizar; esto tiene principal repercusión en los paquetes de onda para la ecuación de Dirac, ya que algunas simulaciones consideran sólo al primer componente del espinor para realizar la simulación. Sin embargo, hemos hecho la simulación comparando los comportamientos separados de cada componente del espinor y el comportamiento conjunto en distintos rangos de energía. Esto es particularmente interesante en el caso de Zitterbewegung, ya que los resultados que hay en la literatura arrojan que el paquete de ondas se separa de manera simétrica, sin embargo, al seleccionar los rangos de energía adecuados, es

posible que la separación sea antisimétrica, lo que indica que hay mayor probabilidad de encontrar a la partícula viajando en una dirección que en otra, sección 5.2.

Refrente a la transformación de Möbius, los teorema de mapeos de semiplanos de la transformación de Möbius, sección 3.4, nos aportó un marco de referencia para entender el comportamiento de la función m de Weyl y sobre el comportamiento de la función espectral ρ . Además de que nos permitió proponer una familia de soluciones para construir a la función m de Weyl-Titchmarsh basado en el comportamiento geométrico del círculo de Weyl, sección 4.5.

Es posible encontrar a la función ψ mediante la familia de soluciones propuesta; sin embargo encontrar a la función φ que sea linealmente independiente de ψ puede ser un poco complicado para que cumplan con las condiciones iniciales. En caso de elegir a las funciones ψ y φ linealmente dependientes, entonces la función m es una constante y no hay manera de obtener información del sistema, debido a que la solución φ es un múltiplo de ψ , es decir $\varphi = c\psi$, entonces al formar la función m de Weyl, se cancelan los términos de ψ y ψ' y nos queda la constante c .

Para evitar este problema en la construcción numérico de la función m de Weyl-Titchmarsh, Se observó que las funciones solución ψ y φ que forman a la función m deben cumplir exáctamente las condiciones iniciales. Si ψ es de la forma $e^{ig_\lambda(x)}$, entonces la restricción de las condiciones iniciales genera un problema en las derivadas de ψ y φ , es decir, por la regla de la cadena, la derivada de φ debe seleccionarse de forma tal que la derivada función $g_\lambda(x)$ que la compone sea uno, en otro caso, se tiene una divergencia de la solución.

6.2 Aportaciones

En este trabajo se presentaron experimentos numéricos que refuerzan la idea de tener a la función de densidad espectral como un elemento principal en la simulación de paquetes de onda. Además se validó la simulación del paquete de ondas como integral de Stieltjes al verificar que conserva las propiedades cualitativas que se presentan en la simulación del paquete de ondas como integral de Riemann.

En este trabajo se ha presentado una familia de soluciones al problema singular de Sturm-Liouville que permita obtener la función m de Weyl-Titchmarsh. Esta familia, las soluciones son de la forma

$$\psi = e^{ig_\lambda(x)}$$

donde la función $g(x)$ es real y continua. Además, si $g(x) > 0$ entonces es una función monótona no decreciente, y si $g(x) < 0$ es monótona no creciente.

A pesar de que la transformación de Möbius ha sido muy estudiada, se obtuvieron algunos resultados novedosos. Realizamos un par de teoremas para el mapeo de semiplanos de la transformación de Möbius con referencia al eje real e imaginario del plano complejo. Y durante el estudio de los mapeos de la transformación de Möbius se encontró una familia de círculos invariantes bajo la transformación de Möbius.

6.3 Conclusiones

La computación científica es una herramienta para el estudio numérico de sistemas. A pesar de los avances tecnológicos para el desarrollo de computadoras más rápidas, aún es necesario desarrollar técnicas numéricas y matemáticas para bajar la complejidad de los algoritmos que se utilizan o para encontrar resultados con una exactitud mayor a la que presentan los algoritmos actuales.

El estudio geométrico del comportamiento de transformaciones y funciones complejas, nos permiten tener una idea clara sus comportamientos y propiedades. Particularmente, a pesar de que hay mucho trabajo desarrollado en el estudio de la transformación de Möbius, aún hay algunas propiedades muy particulares que aún no se estudiadas como lo son los lugares geométricos que permanecen invariantes bajo esta transformación.

La teoría de Weyl permite tener un marco teórico que permita explicar el comportamiento del sistema cuando hay presencia de espectros continuos o espectros mixtos. Además, existe una relación entre un problema regular y uno singular mediante una aproximación en los límites del intervalo $[a, b]$, lo que permite que el método numérico que se utiliza para trabajar con problemas con alguna región de espectro continuo se utilice para los problemas de espectros discretos.

A pesar de no haber terminado la demostración de que todo problema singular de Sturm-Liouville tiene una solución $\psi = e^{ig(x)}$ para el el valor inicial, donde $g(x)$ es una función $f : \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}$, tenemos indicios de que efectivamente es posible tener una solución de esta forma en la teoría de Weyl. Aunque hay una gran cantidad de trabajo desarrollado en el área del problema singular de Sturm-Liouville, aún no quedan claras algunas propiedades y comportamientos de la función m de Weyl como en la distribución de los polos conforme varían las condiciones en la frontera para los casos de espectro continuo. Además, se debe ser cuidadoso en la selección de las funciones solución que construyen a m de que efectivamente cumplan con las condiciones iniciales.

6.4 Trabajo a futuro

Se realizaron los estudios geométricos del problema singular de Sturm-Liouville para los casos de dominio finito y semi-infinito. Se pretende terminar el estudio para el caso de intervalo infinito.

En el desarrollo del trabajo, se propuso una familia de soluciones ψ que permitan obtener la función m de Weyl. Sin embargo, aún falta de demostrar que todo problema singular de Sturm-Liouville tiene una solución de la forma $\psi = e^{ig(x)}$, para el caso de valores iniciales.

Evidentemente es necesario hacer un estudio más exhaustivo de la función $g(x)$, se obtuvieron algunas propiedades cualitativas de la solución y su relación con el espacio de los valores propios.

Para el caso finito y semi-infinito es deseable profundizar en la relación que puede existir entre la clasificación de puntos singulares oscilatorios y no oscilatorios con la función $g(x)$.

En el caso de los paquetes de onda relativistas, motivación original de este trabajo, se puede extender el trabajo hacia la construcción de una función m para los operadores de Dirac que nos permita obtener espectros de los sistemas cuánticos relativistas y construir los paquetes de onda como integrales de Stieltjes.

Apéndice A

Visualización de funciones y transformaciones complejas

El problema de la visualización de las funciones complejas es que se requieren cuatro dimensiones para graficarlas (dos para el dominio y otras dos para la imagen). Se han desarrollado diferentes técnicas de graficación para ayudar a visualizar su comportamiento. Posiblemente las principales sean el mapeo conforme, la gráfica del valor absoluto de la imagen y la gráfica del espacio de fase de la imagen¹.

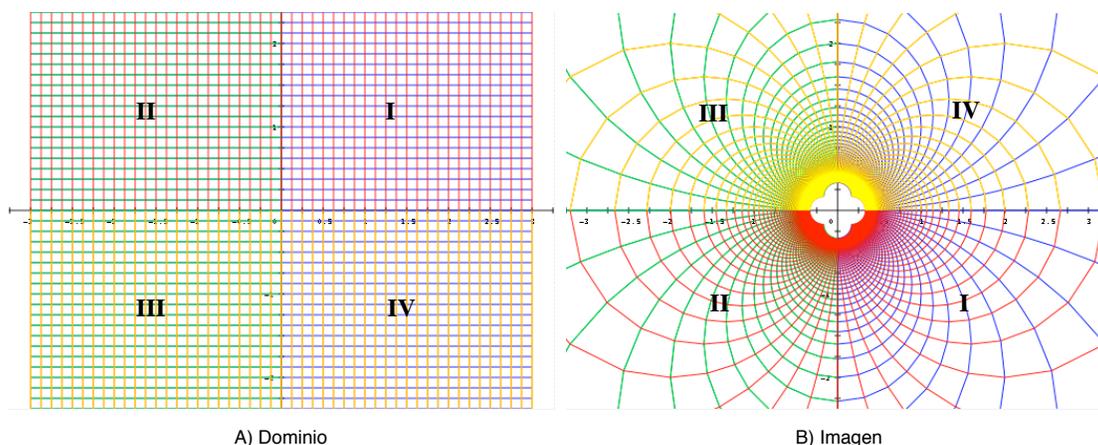


Figura A.1: Mapeo conforme de la función $\frac{1}{z}$

Un ejemplo del mapeo conforme se presenta en la figura (A.1). La figura (A.1.A) presenta la forma en que se mapeará el plano complejo. El barrido en los reales negativos se realiza en color verde, el de los reales positivos en azul, el de los imaginarios negativos en amarillo y el de los imaginarios positivos en rojo. Así, resulta fácil ver que

¹Estas técnicas están documentadas en [61],[65] y eran muy discutidas en los cursos de graficación (Fortran III) y Análisis Numérico I-IV, impartidos por el Dr. H.V. McIntosh en la licenciatura en Computación de la FCFM de la UAP, parte de este trabajo se puede consultar en [37]

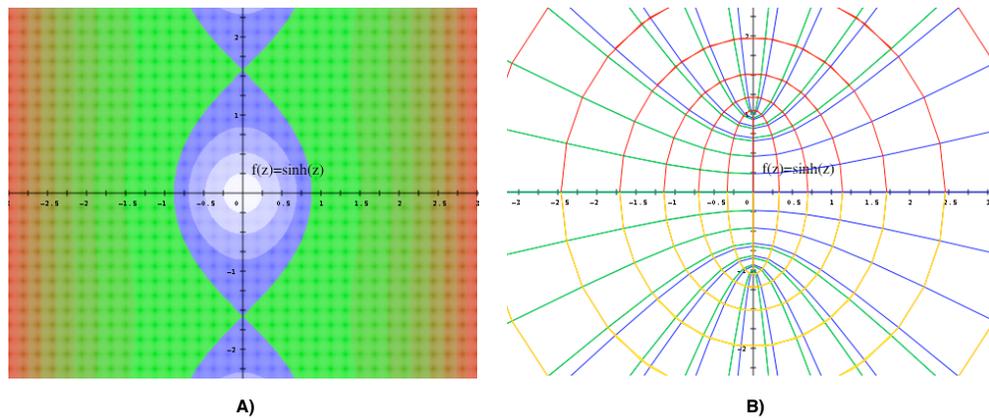


Figura A.2: Curvas de nivel y mapeo conforme de la función compleja \sinh

el cuadrante de reales positivos e imaginarios (A.1) positivos está cuadrículado con líneas azules y rojas, llamémosle cuadrante *I*, como usualmente se le hace en el plano cartesiano. El cuadrante *II*, que corresponde a los números complejos que tienen su parte real negativa y su parte imaginaria positiva, está cuadrículado con líneas rojas y verdes. El cuadrante de reales e imaginarios negativos está cuadrículado con líneas verdes y amarillas, cuadrante *III*. Y finalmente, el cuadrante *IV* está cuadrículado con líneas azules y amarillas, y corresponde a los números complejos con la parte real positiva y la parte imaginaria negativa.

Conociendo los cuadrantes del dominio (por el color de las líneas) podemos inferir algún comportamiento del mapeo de una función compleja. Por ejemplo, la figura (A.1.B) da una idea de como se comporta la transformación, pues el cuadrante *I* (números con la parte real e imaginaria positiva), se mapea en la zona de números con parte real positiva, pero negativa en la parte imaginaria. Otra característica que se aprecia es la acumulación de puntos al rededor del origen del plano complejo.

La representación del valor absoluto del número complejo también ayuda entender el comportamiento de una función compleja. Por ejemplo, la figura (A.2) presenta la gráfica de la función seno hiperbólico en sus representaciones por curvas de nivel del valor absoluto de la función y su mapeo conforme. Los colores que van de blanco a azul presentan las distancias entre 0 y 1 (cero, blanco y 1 azul). El rango de colores de verde a café son distancias que van de 1 a un límite superior, digamos 10. En la figura (A.2.A) se observa que a lo largo del eje imaginario hay una secuencia de regiones blancas, lo cual indica que hay regiones de números que al ser evaluadas por la función están próximos al cero. Estas regiones están señaladas en la figura (A.2.B) en las elipses, alrededor del cero, que forman las líneas que fijan el valor real y barren el eje imaginario (líneas de color amarillo y rojas). Note que la secuencia de regiones cercanas a cero es sobre el eje imaginario en (A.2.A), y esto se refleja en que de las líneas que fijan el valor imaginario y varían la parte real, sólo se acercan a cero y posteriormente se alejan.

La última técnica de visualización que utilizamos es la gráfica del espacio de fase. Es bien conocido que un número complejo puede representarse por un par de números (x, y) , que representan la parte real e imaginaria si se trabaja sobre un plano cartesiano, sin embargo, también es posible utilizar la representación polar para localizar puntos en el plano

$$x = r \cos \theta \quad r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (\text{A.1})$$

$$y = r \operatorname{sen} \theta \quad \theta = \arctan(y/x) \quad (\text{A.2})$$

El espacio de fase presenta los cambios que tiene el ángulo θ en la función. Esta gráfica junto con la representación del valor absoluto de la función (que no es otra cosa que el graficar r) nos dan una información similar a la que se obtiene del mapeo conforme, salvo que la información del comportamiento en de la transformación compleja se presenta en dos gráficas diferentes (una para r y otra para θ).

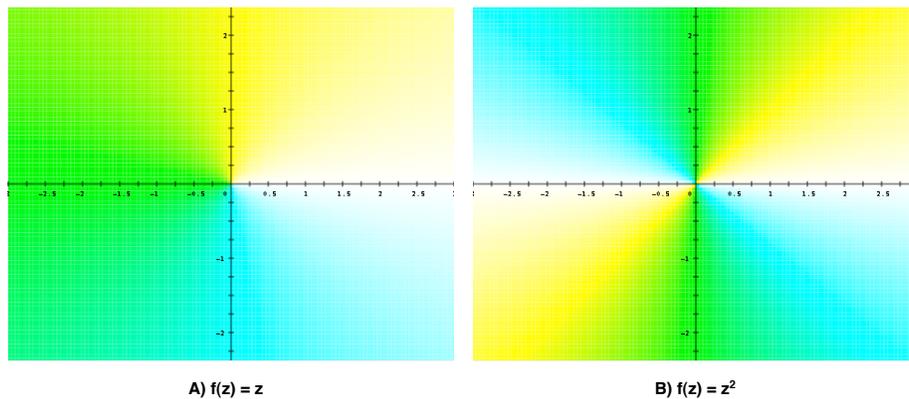


Figura A.3: Espacio de fase de la identidad y z^2

La gráfica (A.3) presenta la forma en que se asignan los colores al plano complejo y un ejemplo con la función z^2 . En la parte (A.3.A), que corresponde a la función identidad, se observa que los números complejos alrededor del eje real positivo tienen asociado el color blanco; los números al rededor del eje real negativo tienen asociado el color verde; los números al rededor del eje imaginario positivo tienen el color amarillo; y los números al rededor del eje imaginario negativo tienen el color cyan. También se observa que los números en el cuadrante I (con la parte real e imaginaria positiva), tienen la transición de colores de blanco a amarillo. La fase de los números del cuadrante II (los números complejos con parte real negativa y parte imaginaria positiva) presentan una transición de colores entre amarillo y verde. La fase de los números imaginarios con parte real e imaginaria positiva (cuadrante III), muestran una transición de colores de verde a azul claro. Finalmente, en el cuadrante IV, donde los números complejos tienen parte real positiva y parte imaginaria negativa, la fase presenta una transición de colores de azul claro a blanco.

La figura (A.3.B) presenta el comportamiento de la fase de la función z^2 . Claramente se observa que todo el eje real tiene asociado el color blanco, lo que indica que el mapeo resultante pasa al eje real positivo, lo cual es consistente con el hecho que el cuadrado de un real es un número positivo. En el caso de los números en el eje imaginario, se observa que todos los números se mapean al eje real negativo (color verde), lo cual es consistente con el hecho de que el cuadrado de un número imaginario es un número real negativo.

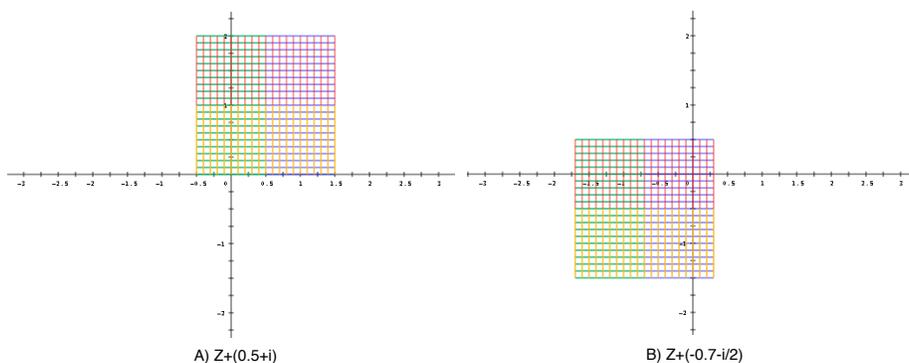


Figura A.4: Ejemplos de translación en el plano complejo

Una vez que hemos discutido brevemente las técnicas de visualización que utilizaremos, veremos el comportamiento de las transformaciones (3.5)(3.6) y (3.7). La transformación (3.8) es equivalente a (3.5). Así, se mostrará el comportamiento de la translación, escalamiento y la inversión.

A.1 La translación $z + A$

La translación no presenta problemas de entendimiento, simplemente mueve el origen del plano complejo al número complejo A . Ejemplos de translaciones se muestran en la figura (A.4), en ambos ejemplos se mapea únicamente una región del plano complejo, esta región es $\mathbb{C}_1 = \{x + iy | x, y \in [-1, 1]\}$. La figura (A.4.A) muestra la translación al punto $A = 0.5 + i$. Y la figura (A.4.B) muestra la translación al punto $A = -(0.7 + 0.5i)$. La figura (A.5) muestra los contornos del módulo y la fase de la translación al punto $A = 0.5 + i$, cuyo mapeo conforme se muestra en (A.4.A). Note que el cero está indicado en el punto $-A = -(0.5 + i)$, debido a que con la translación del origen, este punto queda situado en el cero (esto es, si $z + A = 0, \Rightarrow z = -A$). El punto al infinito se alcanza cuando $z = \infty$. La forma de las gráficas no varía de la de la identidad z , como se puede apreciar en la figura (A.3.B), salvo la posición del cero.

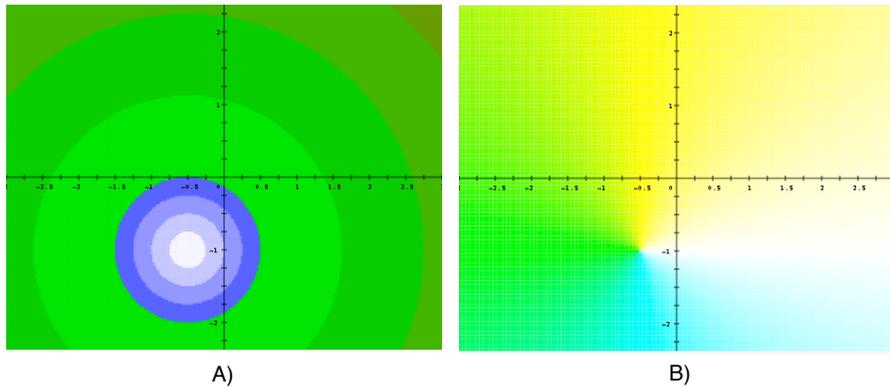


Figura A.5: Contornos y fase de una translación

A.2 La multiplicación Az

La transformación multiplicación $f(z) = az$ se presenta como una rotación y escalamiento del dominio de la función, esto se puede apreciar en la figura (A.6). La figura (A.6)

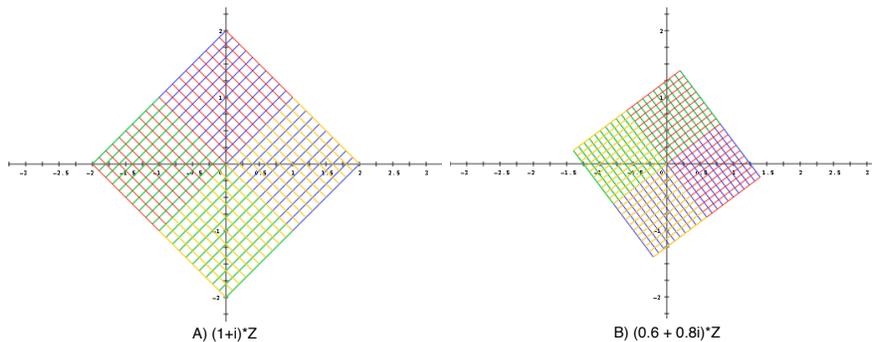


Figura A.6: La multiplicación compleja es una rotación y un escalamiento

presenta dos ejemplos de multiplicación. El dominio que se está multiplicando es $\mathbb{C}_1 = \{x + iy \mid x, y \in [-1, 1]\}$.

Este efecto se explica debido a que, si utilizamos la representación exponencial de los números complejos, $z = re^{i\theta}$ y $A = Re^{i\phi}$, entonces la multiplicación de ambas cantidades queda como:

$$Az = rRe^{i\theta+i\phi}$$

lo que significa que en una multiplicación de complejos hay un escalamiento (la multiplicación de la distancia del cada número con el origen) y una rotación que es la suma de los ángulos de cada uno de los puntos. Note que si $a \in \mathbb{R}$, esto simplemente es un escalamiento y no se incluye la rotación.

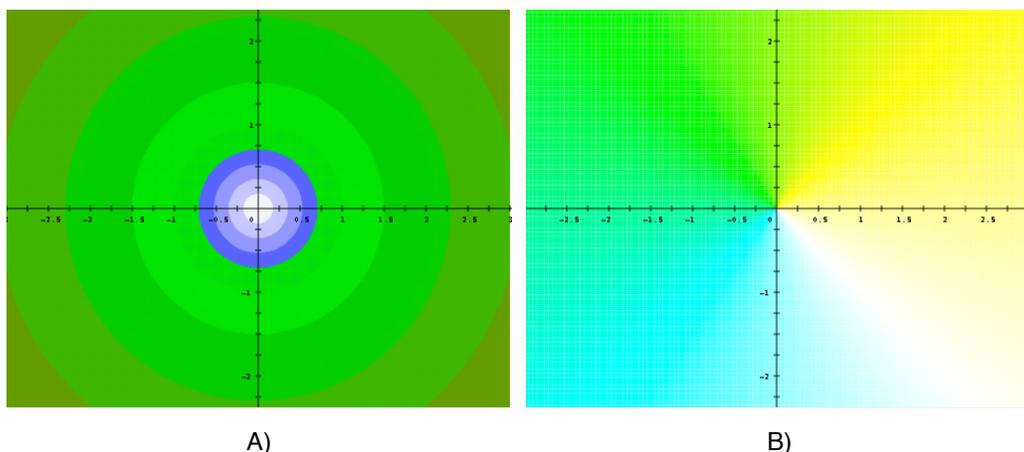


Figura A.7: Contornos y fase de la multiplicación Az

En este caso, el cero se tiene cuando $z = 0$, como se aprecia en la figura (A.7.A), y se alcanza el punto al infinito cuando $z = \infty$.

Si revisamos nuevamente el ejemplo $Az = (1 + i)z$, que se muestra en las figuras (A.6.A), (A.7.A) y (A.7.B), se observa que el mapeo conforme presenta una rotación de $\pi/4$ del plano \mathbb{C}_1 . Esto se debe a que, tomando las expresiones de (A.1) y (A.2), si $A = x + iy = 1 + i$, entonces

$$\phi = \arctan(1/1) = \pi/4 = 45^\circ \quad (\text{A.3})$$

La figura (A.7.B) podrá parecer un poco desconcertante, pues la rotación se muestra en sentido contrario, pero debe tenerse en cuenta que en realidad lo que sugiere es el comportamiento que tendrán los números después del mapeo. Por ejemplo, el color blanco en (A.7.B) está asociado a la línea de los números en el plano complejo con fase $-\pi/4 = -45^\circ$, y esto indica que estos números tendrán una rotación de 45° para ser mapeados al eje de reales positivos —recuerde que la fase de número alrededor del eje de reales positivos está asociado con el color blanco, como se discutió en la sección A—. Es decir la gráfica en general muestra la dirección hacia donde se mapearán los números de esa región. Así la gráfica (A.7.B) muestra una rotación de $-\pi/4$ en todo el plano complejo, comparado con la gráfica de z que se muestra en la figura (A.3.A).

La figura (A.7.A) también muestra el cambio de escala que sufre el radio con este escalamiento, como el radio ahora es mayor $A = (1 + i)$, $\Rightarrow r = \sqrt{2}$. Esto se aprecia en el círculo azul, de la figura (A.7.A), que indica los números con una distancia a uno con el origen. Esto es

$$rR = \sqrt{2}R = 1, \Rightarrow r = \frac{\sqrt{2}}{2} = 0.7071067811865476$$

lo cual se aprecia perfectamente en la intersección del margen del círculo azul y los ejes real e imaginario de la figura (A.7.A).

A.3 La transformación $1/z$

El mapeo conforme resultante al graficar la función $1/z$ se muestra en la figura (A.1). Por una simple inspección se puede observar que el la función inversa $1/z$ mapea los números del cuadrante I al cuadrante IV y del IV al I . Similarmente “intercambia”

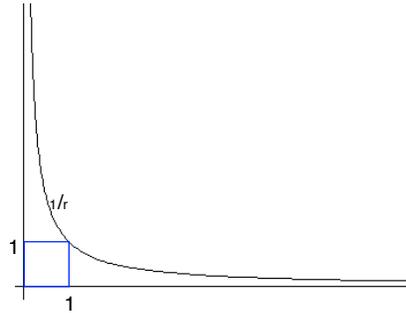


Figura A.8: Gráfica de r^{-1}

los cuadrantes II y III . Esto se debe a que si tomamos la representación de Euler, esto es $z = re^{i\theta} = r(\cos \theta + i \text{sen } \theta)$, entonces la inversa de z , se puede obtener como

$$z^{-1} = r^{-1}e^{-i\theta} = r^{-1}(\cos \theta - i \text{sen } \theta) \quad (\text{A.4})$$

La reflexión se debe al cambio de signo en el elemento exponencial de z .

Sea C_1 el círculo unitario de con centro en el origen del plano complejo, entonces se puede notar que, debido al comportamiento de r^{-1} , ver figura (A.8), los números complejos con radio r mayor a 1 se mapean con un radio $1/r$, y caen dentro del círculo C_1 , y los complejos que están dentro de este círculo unitario, se mapean fuera de C_1 .

La figura (A.9.A) presenta de manera más clara los mapeos de las líneas paralelas al eje real (con color verde la región negativa y azul la región positiva). De manera similar (A.9.B), presenta el mapeo de las líneas paralelas al eje imaginario (con color amarillo la región negativa y color rojo la región positiva del eje imaginario). Se puede observar que al mapear las líneas paralelas al eje real, las regiones positivas y negativas, permanecen en la misma región del plano complejo. Sin embargo, el mapeo de las líneas paralelas al eje imaginario ha cambiado de región, es decir, la región negativa ha pasado a la región positiva y viceversa, tal y como presenta en la ecuación (A.4),

Al revisar nuevamente las figuras (A.1.A) y (A.9) se aprecia que el mapeo conforme presenta cuatro familias de círculos concéntricos y, se puede intuir que todos estos espacios geométricos tocan el origen, estas familias de círculos estan generadas por la forma en que estamos recorriendo el plano complejo; hay dos familias de círculos para las líneas paralelas al eje real y las dos familias restantes para las líneas paralelas al eje imaginario.

En realidad lo que hace el mapeo $1/z$ es la inversión de plano complejo al círculo unitario con centro en el origen C_1 . Es decir, en el interior del círculo C_1 se mapeo al

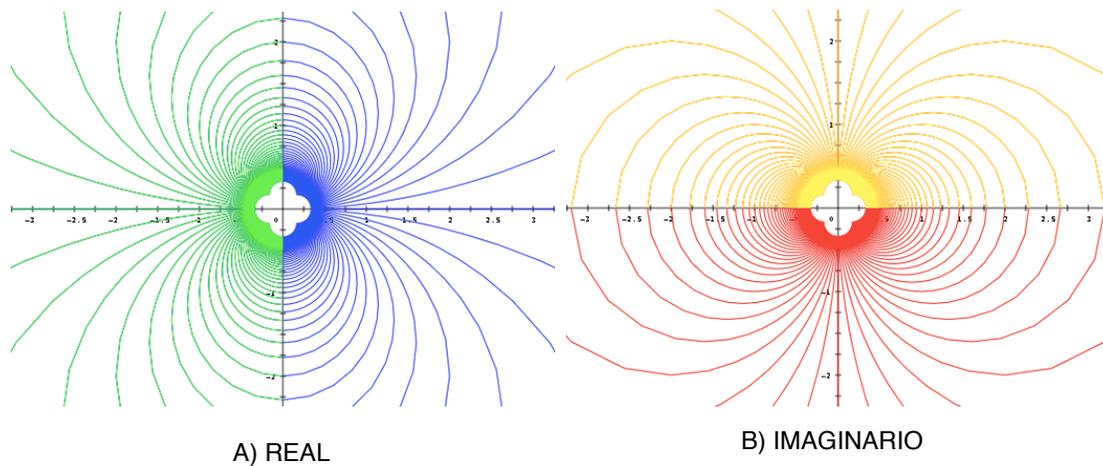


Figura A.9: Mapeo real y mapeo imaginario de $1/z$

resto del plano complejo, y los números fuera del círculo al interior de éste. A este círculo se le llama “*círculo inversor*”². Esto no debe causar extrañeza si se piensa en la proyección estereográfica que se realiza del plano complejo a la esfera de Riemann, y lo que indica esta inversión es el cambio del emisferio en dicha esfera[37][61]. De hecho, al observar la gráfica de la fase de $1/z$ (A.10.B), se puede pensar que se está observando el comportamiento de la fase, de la función identidad $f(z) = z$, en el polo donde está situado el punto al infinito sobre la esfera de Riemann.

Finalmente, la función $\frac{1}{z} = \infty$ cuando $z = 0$, y $\frac{1}{z} = 0$ cuando $z = \infty$.

²Una discusión completa sobre la inversión compleja se puede encontrar en el capítulo 3 de [61]

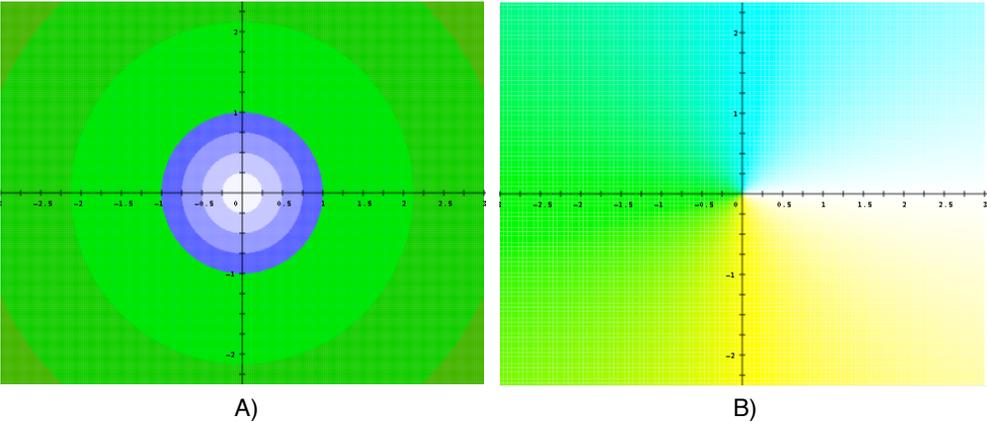


Figura A.10: Contorno y fase de $1/z$

Bibliografía

- [1] Alfio Quarteroni. Mathematical models in science and engineering. *Notices of ACM*, 56(1), 2009.
- [2] Richard P. Hooper. Applying the scientific method to small catchment studies: a review of the panola mountain experience. *Hydrological Processes*, (5):2039–2050, 2001.
- [3] Michael J. Quinn. *Parallel Programming in C with MPI and OpenMP*. McGraw Hill, New York, 2003.
- [4] Richard M. Satava. The scientific method is dead-long live the (new) scientific method. *Surg Innov.*2005, (12):173,176, 2005.
- [5] Roger McHaney. *Computer Simulation: A Practical Perspective*. Elsevier Science & Technology Books, 1991.
- [6] S.C. Chapra and R.P. Canale. *Numerical Methods for Engineers*. McGraw Hill, 5th edition, 2006.
- [7] Jack Dongarra, Ian Foster, Geoffrey Fox, William Gropp, Ken Kennedy, Linda Torczon, and Andy White, editors. *Sourcebook of parallel computing*. Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, 2003.
- [8] Towards 2020 science, 2005.
- [9] E. Levin. Grand challenges for computational science. *Communication of ACM*, 32(12):1456–1457, Dec, 1989.
- [10] Nature special issue, 2020 computing. *Nature*, 440(7083):383–580, March 2006.
- [11] Harold V. McIntosh. *Group Theory and its applications*, volume 2, chapter Symmetry and Degeneration. Academic Press, 1972.
- [12] Harold V. McIntosh. *Group Theory and its applications*, volume 3, chapter Quantization as an Eigenvalue Problem. Academic Press, 1975.

- [13] Abraham Goldberg, Harry M. Schey, and Judah L. Schwartz. Computer-generated motion pictures of one-dimensional quantum-mechanical transmission and reflection phenomena. *American Journal of Physics*, 35(3):177–186, 1967.
- [14] John D. Pryce. *Numerical solution of Sturm-Liouville problems*. Oxford University Press, USA, 1993.
- [15] B.M. Brown and W.D. Evans. *Spectral theory and computational methods of Sturm-Liouville problems, Lectures notes in pure and applied mathematics*, volume 19, chapter The Computation of the Titchmarsh-Weyl m -Function, pages 197–210. Marcel Dekker. INc., 1997.
- [16] B.M. Brown, D.K.R. McCormack, and A. Zettl. On a computer assisted proof of eigenvalues below the essential spectrum of the sturm-liouville problem.
- [17] Erkki Brändas, Harold V. McIntosh, and Michael Hehenberger. Dispersion relations and spectral densities. *International Journal of Quantum Chemistry*, 9:103–117, 1975.
- [18] Michael Hehenberger, Harold V. McIntosh, and Erkki Brändas. Weyl's theory applied to the stark effect in the hydrogen atom. *Phys. Rev. A*, 10(5):1494–1506, Nov 1974.
- [19] A. Cisneros and H.V. McIntosh. A proposed definition of resonant states. *International Journal of Quantum Chemistry*, 28:135–159, 1985.
- [20] Harold V. McIntosh Sergio V. Chapa Vergara. *Ecuaciones Diferenciales y la Teoría de Weyl, Parte I: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias*". este...., México, D.F., 2004.
- [21] Harold V. McIntosh Sergio V. Chapa Vergara. *Ecuaciones Diferenciales y la Teoría de Weyl, Parte II: Teoría de Weyl*. México, D.F., 2008.
- [22] J. Parker and Jr. C.R. Stroud. Coherence and decay of rydberg wave packets. *Physical Review Letter*, 56(716), 1986.
- [23] Edwin C. Kemble. *The Fundamental Principles of Quantum Mechanics with Elementary Applications*. Dover Publications, New York, 1958.
- [24] B. Michael Carter, Van Brunt. *The Lebesgue-Stieltjes Integral (Undergraduate Texts in Mathematics)*. Springer, New York, 2000.
- [25] Harry Pollard. On stieltjes' integral equation. *Annals of Mathematics*, 46(1), January 1945.
- [26] H. J. ter Horst. Riemann-Stieltjes and Lebesgue-Stieltjes integrability. *The American Mathematical Monthly*, 91(9):551–559, November 1984.

- [27] B.M. Levitan and I.S. Sargsjan. *Sturm-Liouville and Dirac Operators*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1990.
- [28] L. Sakhnovich. Weyl-titchmarsh matrix functions for matrix dirac-type. *Inverse Problems*, (18), 2002.
- [29] E.C. Titchmarsh. On the relation between the eigenvalues in relativistic and non-relativistic quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society*, 266(1324):33–46, 1964.
- [30] Leon Greenberg and Marco Marletta. Numerical methods for higher order sturm-liouville problems. *J. Comput. Appl. Math.*, 125(1-2):367–383, 2000.
- [31] Marletta M. Ghelardoni P., Gheri G. Spectral corrections for sturm-liouville problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 132:443–459(17), 15 July 2001.
- [32] Leon Greenberg and Marco Marletta. Numerical solution of non-self-adjoint Sturm–Liouville problems and related systems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 38(6):1800–1845, 2001.
- [33] Bernd Thaller and B. Thaller. *The Dirac Equation*. Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, 1992.
- [34] Bernd Thaller and B. Thaller. *Visual Quantum Mechanics: Selected Topics with Computer Generated Animations of Quantum Mechanical Phenomena with Cdrom*. Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, 2000.
- [35] Bernd Thaller and B. Thaller. *Advanced Visual Quantum Mechanics with Cdrom*. Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, 2005.
- [36] J.A. Wheeler M. Tegmark. 100 year of quantum. *Scientific American*, pages 67–75, February 2001.
- [37] Harold V. McIntosh. Complex analysis, Abril 2001.
- [38] Charles van Loan Cleve Moler. Ninteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty five years later. *SIAM Review*, 45(1), February 2003.
- [39] E. Schrödinger. Quantisierung als eigenwertproblem. *Annalen der Physik*, 4(79):361–376 and 489–527, Mar 1926.
- [40] V.G. Kirby B.M. Brown and J.D. Pryce. A numerical method for the determination of the titchmarsh-weyl m -coefficient. *Proceeding of the Royal Society of London*, 435:535–549, 1991.
- [41] F.W. Olver. *Introduction to asymptotics and special functions*. Academic Press, 1974.

- [42] G.L. Sewell. An approximate relation between energy levels of a particle in a field of a given potential energy, calculated on the relativistic and non-relativistic theories. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 45:631–637, 1949.
- [43] Harold V. McIntosh. Resonance in the Dirac harmonic oscillator, November 4, 2000.
- [44] Harold V. McIntosh. *Quantum Science: Methods and Structure*, chapter Quantization and Green's function for systems of linear differential equations, pages 277–294. Plenum Press, New York, 1976.
- [45] P.A.M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Royal Society of London Proceedings Series A*, 117:610–624, Feb 1928.
- [46] Jerzy Kaminski Iwo Bialnicki-Birula, Marek Ciepak. *Theory of Quanta*. Oxford University Press, New York, 1992.
- [47] Byron L. Coulter and Carl G. Adler. The relativistic one-dimensional square potential. *American Journal of Physics*, 39:305–309, 1971.
- [48] Max Born. *Nobel Lectures, Physics 1942-1962*, chapter The statistical interpretation of quantum mechanics. Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1964.
- [49] P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford: Clarendon Press, 1930.
- [50] Bernd Thaller. Visualizing the kinematics of relativistic wave packets, 2004.
- [51] J. von Neumann. *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Princeton Univ. Press, Princeton, New Jersey, 1955.
- [52] H. Minowa H. Nitta, T. Kudo. Motion of a wave packet in the Klein paradox. *American Journal of Physics*, 67(11):996–971, November 1999.
- [53] H.B. Keller. *Numerical Solution of Two Point Boundary Value Problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia Pennsylvania, 1976.
- [54] Pereyra. *Studies in Numerical Analysis*, volume 24, chapter Finite Difference Solution of Boundary Value Problem in Ordinary Differential Equations. MAA Studies in Mathematics, 1984.
- [55] Reiss H.R Roman J.S.1, Roso L.1. Evolution of a relativistic wavepacket describing a free electron in a very intense laser field. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 33(10):1869–1880, 2000.
- [56] C.H. Keitel G.R. Mocken. Quantum signatures in laser-driven relativistic multiple scattering. *Physics Review Letter*, 91, 2003.

- [57] C.H. Keitel G.R. Mocken. Quantum dynamics of relativistic electron. *Journal of Computational Physics*, 199:558–588, 2004.
- [58] C. H. Keitel J. Peatross, C. M§ller. Electron wave-packet dynamics in a relativistic electromagnetic field: 3-d analytical approximation. *Optics Express*, 15(10):6053–6061, may 2007.
- [59] D.M. Volkov. Über eine klasse von losungen der diracschen gleichung. *Zeitschrift fur Physik*, 95(250), 1935.
- [60] Rafael del Río. *Sturm-Liouville Theory:Past and Present*, chapter Boundary Conditions and Spectra of Sturm-Liouville Operators, pages 217–235. Basel-Boston-Berlin, 2005.
- [61] Tristan Needham. *Visual Complex Analysis*. Oxford University Press, Clarendon Press, 1997.
- [62] H.S.M. Coexter. *Proc. International Conference of Theory of Groups*, chapter The Lorentz Group and the Group of Homographies, pages 73–77. Gordon and Breach, New York, 1967.
- [63] L.V. Ahlfors. *Complex Analysis*. McGraw-Hill, 3rd edition, 1979.
- [64] Hans Schwerdtfeger. *Geometry Of Complex Numbers*. Dover Publications, Inc., New York, 1979.
- [65] Hans Lundmark. Visualizing complex analytic functions using domain coloring.
- [66] Caroline Series David Mumford and David Wright. *Indra’s Pearls: The Vision od Felix Klein*. Cambridge University Press, 2002.
- [67] David J. Wright. Möbius maps applied to circles.
- [68] A.C. Dixon. On the series of sturm and liouville, as derived from a pair of fundamental integral equations instead of a differential equation. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A*, 33(211):411–432, 2000.
- [69] E. A. Coddington and M. Levinson. *Theory of Ordinary Differential Equations*. McGraw-Hill, 1955.
- [70] Hermann Weyl. über gewöhnliche differentialgleichungen mit singularitäten und die zugehörigen entwicklungen willkürlicher funktionen. *Mathematische Annalen*, 68:220–269, 1910.
- [71] W. N. Everitt. *Sturm-Liouville Theory:Past and Present*, chapter Sturm-Liouville Theory 1900 to 1950, pages 217–235. Basel-Boston-Berlin, 2005.

-
- [72] M.H. Stone. *Linear Stransformations in Hilbert Space*. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 1932.
- [73] E.C. Titchmarsh. *Eigenfunctions Expansions, Associated with Second-order Differential Equations, Part I*. Oxford University Press (Clarendon), London and Ney York, 1962.
- [74] E.C. Titchmarsh. *Eigenfunctions Expansions, Associated with Second-order Differential Equations, Part II*. Oxford University Press (Clarendon), London and Ney York, 1962.
- [75] J. Chaudhuri and W.N. Everitt. The spectrum of ordinary second order differential operators. *Proceeding of the Royal Society of Edinburgh A*, 68(1):95–115, 1968.
- [76] C.T. Fulton and S.Pruess. The computation of spectral density functions for singular sturm-liouville problems involving simple continuous spectra. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 24(1):107–129, 1998.
- [77] B. M. Brown, M. S. P. Eastham, D. K. R. McCormack, and M. Plum. On a new algorithm for the computation of enclosures for the titchmarsh-weyl m-function. 1998.
- [78] Leonard Schiff. *Quantum Mechanics*. McGraw Hill Inc., New York, USA, 2nd edition, 1955.