

BP
T
515.25
V 836

1

**ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER CON UN
POTENCIAL DE POZO POCO PROFUNDO.**

Monografía que presenta

SIXTA ISABEL VIVANCO PALACIO

para obtener el grado de Matemático.

Director de Tesis:

DR. ANA MAGNOLIA MARIN.

FACULTAD DE CIENCIA EXACTAS Y NATURALES.

UNIVERSIDAD DE CARTAGENA

2008.

56171

Dedico este trabajo con todo mi cariño a mis padre,

Betty Palacio Vega,

Manuel Vivanco Villareal y

hermano Victor Manuel Vivanco Palacio

Doy gracias en primer lugar,

al que dio su vida por nosotros, JESUCRISTO,

a la Dra. Ana Magnolia Marin,

y a todos mis amigos que de una u otra forma,

hicieron posible este trabajo.

Índice general

| | |
|---|----------|
| 1. Preliminares | 9 |
| 1.1. Conceptos básico de la mecánica cuántica | 9 |
| 1.2. Transformada discreta de Fourier | 12 |
| 1.2.1. Propiedad de la transformada discreta de Fourier | 13 |
| 1.3. Función de onda | 15 |
| 1.4. Niveles de energía | 16 |
| 1.5. Potencial de velocidad | 16 |
| 1.6. El pozo de potencial | 17 |
| 1.7. Operadores en espacio un de Hilbert | 19 |
| 1.7.1. Opcrador lincal | 19 |
| 1.7.2. Operador continuo | 19 |
| 1.7.3. Soporte compacto | 19 |
| 1.8. Espectro esencial | 19 |
| 1.8.1. O grande | 20 |
| 1.9. Ecuaciones en diferencia finita | 20 |
| 1.10. Función delta Kronecker | 23 |

| | |
|---|-----------|
| 1.11. Ecuaciones en diferencia homogéneas | |
| lineales | 23 |
| 1.11.1. Ecuaciones de coeficientes constantes | 24 |
| 1.12. Fórmulas de interpolación de Koteinikov | 25 |
| 2. Asintótica de la ecuación discreta de Schrödinger | 27 |
| 2.1. Lema 2.1. | 27 |
| 2.2. Lema 2.2 | 30 |
| 2.3. Teorema 2.3 | 31 |

Introducción.

La ecuación de Schrödinger es considerada como la ecuación de propagación de la función de onda. La función de onda $\Psi(x, t)$ es una función compleja que describe la amplitud del campo de materia asociado a una partícula que se encuentra en un punto x del espacio en un tiempo t . La función de onda describe la dinámica del sistema bajo observación y por lo tanto contiene toda la información acerca del comportamiento de la partícula asociada. La función de onda no es directamente observable, pero suministra información respecto a la probabilidad de la posición de la partícula.

Uno de los aspectos que la función de onda define es la relación entre la frecuencia y la longitud de onda, es decir, la relación de dependencia del tiempo y el espacio.

Consideremos tal ecuación

$$(-\Delta + U)\Psi = E\Psi, \quad (1)$$

en la cual

- Δ es el laplaciano en \mathbf{R}^n .
- $U : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ es una función potencial que describe un pozo de potencial de poca profundidad; esto quiere decir que

$$U(x) = \varepsilon V(x),$$

con $V(x) \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$ (el espacio de las funciones infinitamente diferenciables con soporte compacto \mathbf{R}^n) y supondremos que $\varepsilon \rightarrow 0$. (véase Fig. 1).

- $\Psi : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{C}$ es la función de onda y,
- E es la energía total de la partícula cuyo movimiento es descrito por dicha ecuación.

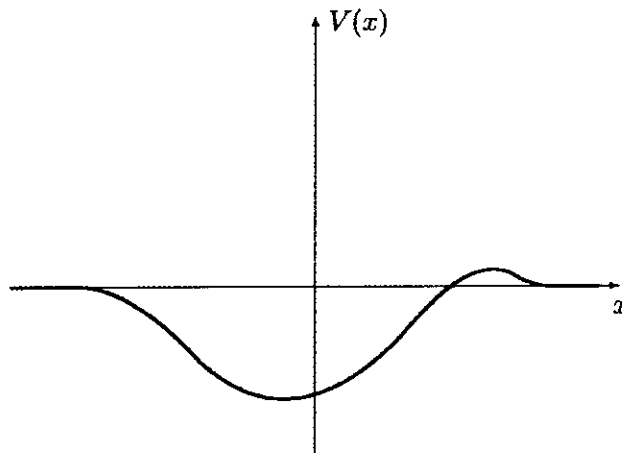


FIGURA 1.

Es bien conocido que en este caso tiene solo un valor propio

$$E_0 = -\beta^2, \beta \in \mathbf{R}.$$

ÍNDICE GENERAL

7

Bajo es espectro esencial $[0, \infty)$, cuando ocurre que

$$\int_{\mathbf{R}^n} V(x) dx \leq 0.$$

y la dimensión n del espacio es 1 o 2. Esto fue determinado para $n = 1$ y en caso radialmente simétrico para $n = 2$ ya en el famoso libro de Landau y Lifshitz [5] y después fue demostrado en el caso general en dimensión 2 por Simon [7]. Resultado cercano al comportamiento límite de la resolvente pueden ser encontrado en [2], [3]. En [8] un método diferente fue usado para obtener las asintóticas de las funciones propias (que no aparecen del todo en la aproximación de Simon). Esta es basada en una construcción explícita de funciones propias aproximadas. Sucede que esta construcción es completamente elemental cuando uno pasa a la representación de momentos. Además este método es igualmente eficiente para la ecuación de Schrödinger y el problema de ondas de agua atrapadas por una sierra submarina, que, como es conocido en el folklore, es análogo a la ecuación de Schrödinger con un pozo de potencial poco profundo.

El problema consiste en aplicar el método basado en la construcción de asintóticas de funciones propias para la ecuación discreta de Schrödinger con un pozo de potencial poco profundo es: $4\text{sen}^2(p/2) + U(x)$, su comportamiento para p pequeño es idéntica. Luego utilizaremos ecuaciones en diferencias centradas a la ecuación continua de Schrödinger

$$-\Psi''(x) + \varepsilon V(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (2)$$

Para obtener la ecuación discreta de Schrödinger

$$-(\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}) + \varepsilon V_j \psi_j = E\psi_j. \quad (3)$$

Para los elementos de la sucesión $\Psi = \{\psi_j\} \in l_2\mathbf{Z}$, $j \in \mathbf{Z}$, $x_j \in \mathbf{R}$, $x_j \leq x_{j+1}$ y el potencial $V = \{V_j\}$, buscando soluciones no triviales Ψ de la ecuación (3), donde $E = -\beta^2(\varepsilon)$, $\varepsilon \rightarrow 0$. Por simplicidad V es considerado de soporte compacto, esto es, $V_j = 0$ para $|j| > R$ para algún $R > 0$ suficientemente grande, puesto que el operador de multiplicación por una sucesión finita es compacto en l_2 , el espectro en (3) coincide con el de la ecuación libre ($V_j \equiv 0$) siendo este último el segmento $[0, 4]$. Esta monografía es trabajada sobre el artículo **Shallow Potential Wells for the Discrete Schrödinger Equation** de los autores Joel A. Rodríguez - ceballos y Peter N. Zhevandrov, quienes fueron los primeros en hablar del método propuesto a continuación, en la tesis de maestría presentada por Rodríguez donde Zhevandrov fue el director.

Aquí encontraremos los detalles técnicos de dicho artículo, que trata fundamentalmente en aproximar un valor propio y la función correspondiente de la ecuación unidimensional discreta de Schrödinger cuando esta última tiene potencial pequeño e integrable no negativa sobre el eje real.

El trabajo que presentamos a continuación presenta dos capítulos repartidos de la siguiente forma, en el primer capítulo, encontraremos los preliminares, donde hallaremos las definiciones y procedimientos necesarios para justificar los resultados mostrados en el siguiente capítulo.

En el segundo capítulo nos muestra el teorema principal que trata sobre la aplicación del método (que en adelante lo llamaremos método de Zhevandrov) donde primero se interpola la ecuación unidimensional discreta de Schrödinger al eje real, a través de interpolación de Kotelnikov y siguiendo con el método mencionado se demuestra constructivamente la existencia de un valor propio negativo y la función propia correspondiente.

Capítulo 1

Preliminares

En esta sección, se introduce las definiciones generales pertinentes al desarrollo de este trabajo. Además, se presentarán algunos resultados básicos de la teoría correspondiente a la ecuación de Schrödinger.

1.1. Conceptos básico de la mecánica cuántica

El fenómeno que físicamente se conoce como onda que se propaga con *velocidad de fase* v se caracteriza desde el punto de vista matemáticos por una función, tiene la forma.

$$u(x, t) = \phi(x - tv) : \mathbf{R}^2 \longrightarrow \mathbf{C}, \quad (1.1)$$

donde ϕ es una función arbitraria, x es la posición de cada punto del espacio y t el tiempo. Si la onda es *sinusoidal, monocromática y plana*, se tiene que $v = \frac{\omega}{\kappa}$, donde ω es la *frecuencia angular de la onda*, $|\kappa| = \frac{2\pi}{\lambda}$ es el número de onda y λ es

la longitud de onda. Por tanto en este caso

$$u(x, t) = Ae^{i(\omega t - \kappa x)}. \quad (1.2)$$

donde A es la amplitud de las oscilaciones. Una *onda estacionaria* es la formada como resultado de la superposición de ondas móviles que se propagan la una al encuentro de la otra y que tienen la misma frecuencia y amplitud. Si dichas ondas son $u_1(x, t) = Ae^{i(\omega t - |\kappa|x)}$, $u_2(x, t) = Ae^{i(\omega t + |\kappa|x)}$, su superposición origina una *onda plana estacionaria* definida por

$$u(x, t) = 2A \cos \kappa x e^{i\omega t}. \quad (1.3)$$

Ahora bien, vamos a considerar un sistema *conservativo* de una partícula en movimiento unidimensional. Denotaremos m la masa de la partículas, x su posición y p su *momentum*. La energía total E es entonces constante, en el tiempo y es la suma de sus partes cinética $p^2/2m$ y potencial $U(x)$ (ésta última la cual tampoco depende de t por ser sistema conservativo). Así

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x), \quad (1.4)$$

expresión que se puede resolver para p , obteniendo

$$p = (2m[E - U(x)])^{1/2}. \quad (1.5)$$

Por otra parte L. de Broglie postuló la existencia de cierta *onda asociada* a una partícula en movimiento denominada *onda de materia*. La fórmula de De Broglie establece la dependencia de la longitud de la onda de materia de una partícula en movimiento respecto del *momentum* p de la misma

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.6)$$

donde h es la constante de Plack. Otra de la forma de la fórmula De Broglie es entonces

$$\kappa = \frac{p}{\hbar}, \quad (1.7)$$

donde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Ahora podemos recordar brevemente la derivación de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo o *estacionaria* a partir de la ecuación unidimensional clásica de onda

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad (1.8)$$

aplicada a la onda de materia. Por introducción de la separación de variable

$$u(x, t) = \Psi(x)f(t), \quad (1.9)$$

obtenemos de (1.9)

$$f(t) \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = \frac{\kappa^2}{\omega^2} \Psi(x) \frac{d^2 f(t)}{dt^2}, \quad (1.10)$$

según lo sugiere (3) en (1.10) sustituimos el ansatz $f(t) = e^{i\omega t}$, quedandonos la ecuación de Helmholtz

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = -\kappa^2 \Psi(x), \quad (1.11)$$

que es la ecuación diferencial ordinaria que describe la amplitud espacial $\Psi(x)$ de la onda de materia como una función de la posición x de (7) que

$$\kappa^2 = \frac{2m[E - U(x)]}{\hbar^2}. \quad (1.12)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación de Helmholtz (12) y transponiendo se obtiene la ecuación

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m[E - U(x)]}{\hbar^2} \Psi(x) = 0, \quad (1.13)$$

para la ecuación $\Psi(x)$. A esta ecuación se le denomina ecuación *estacionaria* (o *independiente del tiempo*) unidimensional de Schrödinger de la partícula. A $\Psi(x)$ se le llama simplemente *función de onda* de la partícula. La ecuación anterior puede escribirse equivalentemente como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (1.14)$$

Este proceso se puede hacer de un modo análogo en el espacio \mathbf{R}^n y así podemos escribir la ecuación n-dimensional de Schrödinger independiente del tiempo para una sola partícula:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r) + U(r)\Psi(r) = E\Psi(r), \quad (1.15)$$

donde ∇^2 (que en adelante simbolizaremos con Δ) es el laplaciano

$$\Delta = \nabla^2 = \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}, \quad (1.16)$$

$r = \{x_j\} \in \mathbf{R}^n$ es el vector de posición de la partícula y $U(r)$ el potencial n-dimensional. Por simplicidad, en nuestro tratamiento matemático subsiguiente el factor $\frac{\hbar^2}{2m}$ lo igualaremos a 1 y usaremos también la notación x en lugar de r para cualquier caso n .

1.2. Transformada discreta de Fourier

Mencionaremos en esta sección la definición formal de la transformada discreta de Fourier:

$$f(x) = \sum_{u=0}^{N-1} F(u) e^{-2j\pi ux/N},$$

para $x = 0, 1, 2, \dots, N-1$.

1.2.1. Propiedad de la transformada discreta de Fourier

Listaremos en este apartado como recordatorio algunas de las más importantes propiedades de la transformada de Fourier. La transformada inversa $f_k = F_n^{-1}[\{f_k\}_{k=0}^{N-1}](k)$ es entonces:

$$f_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} F_n e^{2\pi jnk/N}.$$

Ejemplo 1.

Hallar la transformada discreta de Fourier de la sucesión $x(n) = \{1, 2, 1, 0\}$.

Solución

Para

$$k = 0, \quad X_T[0] = \sum x[n]e^0 = \sum x[n] = 1 + 2 + 1 + 0 = 4,$$

$$k = 1, \quad X_T[1] = \sum x[n]e^{j2\pi n/4} = 1 + e^{j2\pi/4} + e^{j4\pi/4} + 0 = -2j,$$

$$k = 2, \quad X_T[2] = \sum x[n]e^{j4\pi n/4} = 1 + e^{j4\pi/4} + e^{j8\pi/4} + 0 = 0,$$

$$k = 3, \quad X_T[3] = \sum x[n]e^{j6\pi n/4} = 1 + e^{j6\pi/4} + e^{j12\pi/4} + 0 = 2j.$$

Por consiguiente la transformada de Fourier discreta de $x(n)$ es $X_T[k] = \{4, -2j, 0, 2j\}$, para $k = 0, 1, 2, 3$.

Separabilidad

La principal ventaja de la propiedad de la separabilidad es que $F(u, v)$ o $f(x, y)$ puede ser calculada en dos pasos mediante la aplicación sucesiva de transformadas de Fourier unidimensionales o de su inversa:

$$F(u) = \frac{1}{N} \sum_0^{N-1} F(x) e^{-2j\pi x/N},$$

$$F(x) = N \left[\frac{1}{N} \sum_x f(x) e^{-2j\pi y/N} \right].$$

Translación

La propiedad de translación se refleja en los siguientes pares de transformadas:

$$f(x) e^{2j\pi u_0 x} \Leftrightarrow F(u - u_0)$$

$$f(x - x_0) \Leftrightarrow e^{-2j\pi u_0 x/N} F(u - u_0)$$

La doble flecha indica la correspondencia entre la función y su transformada de Fourier y viceversa. Hay que destacar que un desplazamiento espacial no afecta el módulo de la transformada de Fourier, sino únicamente su fase.

Periodicidad y simetría conjugada

La transformada de Fourier con su inversa son periódicas, con un periodo N . Esto es:

$$F(u) = F(u + N).$$

Esto quiere decir, que no basta un solo periodo de transformada, para recuperar $f(x)$ a partir de $F(u)$. En otras palabras, que basta un solo periodo de transformada para especificar completamente $F(u)$ en el dominio de la frecuencia. El mismo comentario es válido para $f(x)$ en el dominio espacial.

Además la transformada de Fourier presenta simetría conjugada (también conocida

1.3. FUNCIÓN DE ONDA

15

como hermítica):

$$F(u) = F^*(-u),$$

$$|F(u)| = |F^*(-u)|,$$

donde $F^*(u)$ es el complejo conjugado de $F(u)$.

Convolución

La convolución de dos funciones $f(x)$ y $g(x)$, denotada por $f(x) * g(x)$ se define como:

$$f_e(x) * g_e(x) = \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} f_e(m)g_e(x - m),$$

para $x = 0, 1, 2, \dots, M - 1$.

1.3. Función de onda

En mecánica cuántica, una función de onda es una forma de describir el estado físico de un sistema de partículas. Usualmente es una función compleja y de cuadrado integrable de las coordenadas espaciales de cada una de las partículas. Las propiedades mencionadas de la función de onda permiten interpretarla como una función de cuadrado integrable. La ecuación de Schrödinger proporciona una ecuación determinista para explicar la evolución temporal de la función de onda y, por tanto, del estado físico del sistema en el intervalo comprendido entre dos medidas (cuando se hace una medida de acuerdo con el postulado IV la evolución no es determinista).

Históricamente el nombre función de onda se refiere a que el concepto fue desarrollado en el marco de la primera física cuántica, donde se interpretaba que las partículas podían ser representadas mediante una onda física que se propaga en el espacio. En la formulación moderna, la función de onda se interpreta como un objeto mucho más abstracto, que representa un elemento de un cierto espacio de Hilbert de dimensión infinita que agrupa a los posibles estados del sistema.

1.4. Niveles de energía

En general, los niveles de energía de una partícula de masa m , confinada en una región unidimensional en la que existe un potencial $E_p(x)$ viene dada por la solución de la ecuación de Schrödinger independientemente del tiempo.

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + E_p(x) \Psi = E \Psi,$$

con las condiciones de contorno

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \Psi(x) = 0.$$

Es decir, E es la energía de un nivel, si la solución de la ecuación de Schrödinger, $\Psi(x)$ tiende asintóticamente a cero para grandes valores de x .

1.5. Potencial de velocidad

Si el movimiento del fluido es irrotacional, el vector velocidad V puede ser representado por el gradiente de un potencial escalar ϕ llamado el potencial de velocidad

$$V = \nabla \phi.$$

1.6. EL POZO DE POTENCIAL

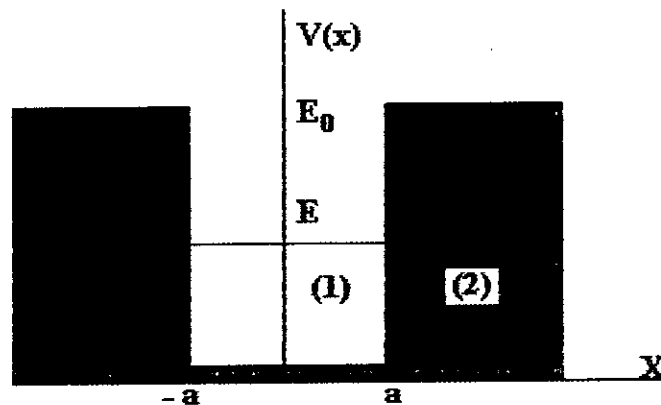
17

El potencial de velocidad es dado por la integral de línea

$$\phi(x, t) = \int_{x_0}^x \sum u_i dx_i,$$

donde el límite inferior x_0 es arbitrario y el límite superior es el punto $x = (x_1, x_2, x_3)$. Esta integral es independiente del camino de integración entre los puntos x_0 y x , ya que la diferencia el valor de cualquier dos integrales, entre los dos puntos es igual a la circulación alrededor del camino cerrado de x_0 a x a lo largo de un camino y el regreso a x_0 a lo largo de otro camino, el cual es igual a cero si el movimiento del fluido es irrotacional.

1.6. El pozo de potencial



De la anterior figura vemos que las soluciones de la ecuación de Schrödinger en las regiones (1) y (2) son respectivamente:

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{iqx} + B_1 e^{-iqx},$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx},$$

$$q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(E_0 - E)}{\hbar^2},$$

$\Psi_2(x)$ debe tender a cero cuando x se hace grande, para ello A_2 tiene que ser cero.

Las condiciones de continuidad de la función de onda $\Psi(x)$ y su derivada primera en la frontera $x = a$ entre las dos regiones de distinto potencial, constituyen un par de ecuaciones que relacionan A_1 y B_1 con B_2 .

Este último parámetro, determina la escala vertical de la función de onda $\Psi(x)$, y se puede obtener a partir de la condición de normalización.

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

La simetría de la función potencial $E_p(x)$ hace que los estados de energía de la partícula puedan ser

- Simétricos si $\Psi(-x) = \Psi(x)$.
- Antisimétricos si $\Psi(-x) = -\Psi(x)$.

Los niveles de energía para los estados simétricos se determinan haciendo

$$\Psi(-x) = \Psi(x).$$

1.7. Operadores en espacio un de Hilbert

1.7.1. Operador lineal

El mapeo $A : A \ni x \rightarrow y \in A$ se llama un operador (lineal) si $A(\alpha x + \beta y) = \alpha Ax + \beta Ay$ para todo $x, y \in D(A)$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ la variedad lineal $D(A)$ es el dominio de definición de A , el conjunto $R(A) = \{Ax, x \in D(A)\}$ se le llama rango de A .

1.7.2. Operador continuo

El operador A es continuo si cada sucesión convergente de $D(A)$, bajo la acción de A , también es convergente, es decir, si para todo $x_n \rightarrow x$ tenemos $Ax_n \rightarrow Ax$ en \mathbb{C} .

1.7.3. Soporte compacto

Sea Ω una región abierta en \mathbb{R}^n , entonces $g \in C_0^\infty(\Omega)$ si g es infinitamente diferenciable y $g = 0$ afuera de un conjunto compacto $\Omega' \subset \Omega$.

1.8. Espectro esencial

El espectro esencial de un operador consiste de todos los puntos del espectro excepto valores propios aislado de multiplicidad finita.

Hemos así añadido al espectro continuo.

1. Cualquiera valores propio incrustados en el espectro continuo o en sus orillas;
2. Cualquiera punto límite del espectro, y
3. Valores propios, si los hay, de multiplicidad infinita.

Examinaremos los casos, esta visto que los puntos del espectro esencial pueden caracterizarse por vectores propios aproximados (posiblemente incluyendo verdaderos vectores propios) como sigue: λ está en el espectro esencial del operador \mathcal{H} si y sólo si existe una sucesión $\{V_i\}_1^\infty$ de vectores unitarios linealmente independiente (o, si prefiere, mutuamente ortogonales) tales $\|\mathcal{H}v_j - \lambda v_j\| \rightarrow 0$ cuando $j \rightarrow \infty$.

1.8.1. O grande

Si $|f(x)/\phi(x)|$ es acotado, escribimos

$$f(x) = O\{\phi(x)\} \quad (x \rightarrow \infty),$$

o $f = O(\phi)$; en otras palabras, f es de orden que no excede a ϕ .

1.9. Ecuaciones en diferencia finita

Estas se usan para calcular cantidades que se definen recursivamente, tal como el n -ésimo coeficiente de una serie de Taylor o de Fourier o el determinante de una matriz $n \times n$ que es desarrollada por menores. Las ecuaciones en diferencia surgen frecuentemente en análisis numérico donde se intenta aproximar sistemas continuos por discretos y en modelos discretos aplicables directo incluyendo la mecánica cuántica. La idea del método de diferencias finitas consiste en aproximar las derivadas que aparecen en el problema de ecuaciones diferenciales ordinarias de forma que se reduzca a resolver un sistema lineal. Comenzamos viendo el método de Diferencias Finitas para un problema de contorno de segundo orden lineal. En concreto, consideramos

1.9. ECUACIONES EN DIFERENCIA FINITA

21

la ecuación lineal:

$$y''(y) = p(t)y'(t) + q(t)y(t) + r(t) \quad t \in [a; b], \quad (1.17)$$

con

$$y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta, \quad (1.18)$$

donde $q(t) > 0$ y $p(t)$ esta acotada bajo estas condiciones el problema de contorno tiene solución.

Hagamos una partición de $[a; b]$, donde:

$$a = t_0 < t_1 < \dots < t_N = b \quad (1.19)$$

$$h = \frac{b-a}{N}, \quad t_j = a + jh \quad j = 0, 1, \dots, N. \quad (1.20)$$

A partir del desarrollo de Taylor veamos las aproximaciones de $y'(x), y''(x)$, estas aproximaciones son la base de los métodos de diferencia finita.

Consideremos en primer lugar el desarrollo de Taylor de tercer orden, para una función $y(x)$, entonces

$$y(t) = y(t_0) + y'(t_0)(t - t_0) + y''(t_0)\frac{(t - t_0)^2}{2} + y'''(c)\frac{(t - t_0)^3}{6}, \quad (1.21)$$

de donde tomamos $t_0 = x, t = x + h$

$$y(x + h) = y(x) + y'(x)h + y''(x)\frac{h^2}{2} + y'''(c_1)\frac{h^3}{6}, \quad (1.22)$$

tomando ahora $t_0 = x, t = x - h$, obtenemos

$$y(x - h) = y(x) - y'(x)h + y''(x)\frac{h^2}{2} - y'''(c_2)\frac{h^3}{6}. \quad (1.23)$$

Restando ambas expresiones

$$y(x + h) - y(x - h) = 2hy'(x) + \frac{h^3}{6}(y'''(c_1) + y'''(c_2)), \quad (1.24)$$

de esta última deducimos

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + \frac{h^2}{12}(y'''(c_1) + y'''(c_2)). \quad (1.25)$$

Por lo tanto, tenemos una aproximación de segundo orden a la derivada de la función en un punto

$$y'(x) \approx \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}. \quad (1.26)$$

Hallemos la aproximación de $y'(x)$

Usando el desarrollo de Taylor de cuarto orden, llegamos:

$$y(t) = y(t_0) + y'(t_0)(t-t_0) + y''(t_0)\frac{(t-t_0)^2}{2} + y'''(t_0)\frac{(t-t_0)^3}{6} + y^{iv}(c)\frac{(t-t_0)^4}{4!}. \quad (1.27)$$

Si $t_0 = x$ y $t = x+h$, obtenemos

$$y(x+h) = y(x) + y'(x)h + y''(x)\frac{h^2}{2} + y'''(x)\frac{h^3}{6} + y^{iv}(c_1)\frac{h^4}{4!}. \quad (1.28)$$

Si $t_0 = x$, $t = x-h$, obtenemos

$$y(x-h) = y(x) - y'(x)h + y''(x)\frac{h^2}{2} - y'''(x)\frac{h^3}{6} + y^{iv}(c_2)\frac{h^4}{4!}. \quad (1.29)$$

Sumando ambas expresiones y despejando el valor de $y''(x)$, tenemos

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + \frac{h^2}{4!}(y^{iv}(c_1) + y^{iv}(c_2)), \quad (1.30)$$

luego usamos la aproximación de segundo orden de $y''(x)$

$$y''(x) \approx \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2}, \quad (1.31)$$

por consiguiente las fórmulas de diferencia finitas centradas para aproximar las derivadas están dado por:

$$y'(t_j) = \frac{y(t_{j+1}) - y(t_{j-1}))}{2h} + O(h^2), \quad (1.32)$$

$$y''(y) = \frac{y(t_{j+1}) - 2y(t_j) + y(t_{j-1}))}{h^2} + O(h^2), \quad (1.33)$$

1.10. Función delta Kronecker

La interpretación más simple del delta Kronecker es como la versión discreta de la función de delta definida por:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{si } i \neq j, \\ 1 & \text{si } i = j. \end{cases}$$

El contorno integrable esta representado por:

$$\delta_{nm} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} z^{m-n-1} dz,$$

dónde γ es el contorno correspondiente al círculo con radio uno donde m, n enteros.

1.11. Ecuaciones en diferencia homogéneas lineales

Miremos los métodos que normalmente se usan para resolver ecuaciones en diferencia lineales homogéneas de orden más alto.

Una ecuación en diferencia lineal homogénea de orden N tiene la forma general

$$a_{n+N} + p_{N-1}(n)a_{n+N-1} + p_{N-2}(n)a_{n+N-2} + \dots + p_1(n)a_{n+1} + p_0(n)a_n = 0, \quad (1.34)$$

donde p_0, p_1, \dots, p_{N-1} son funciones arbitrarias de n . Como es el caso con ecuaciones diferenciales, la solución general a_n es una combinación lineal arbitraria de N soluciones linealmente independiente.

1.11.1. Ecuaciones de coeficientes constantes

Para ilustrar esta propiedad consideremos las ecuaciones de coeficientes constantes, que es la clase más fácil de resolver de entre las ecuaciones en diferencia lineales homogéneas de orden más alto. Estas ecuaciones toman la forma del siguiente ejemplo el la que los coeficientes p_0, p_1, \dots, p_{N-1} son independientes de n .

Recordando de nuestro tratamiento con ecuaciones diferenciales constantes, que las soluciones tienen normalmente la forma de exponenciales: $y(x) = \exp(rx)$. Para una ecuación diferencial de N -ésimo orden hay N soluciones de la forma $\exp(r_1x), \exp(r_2x), \dots, \exp(r_Nx)$ a menos que el polinomio en r que resulta de sustituir $y(x) = \exp(rx)$ tenga raíces repetidas. Si r_1 es una raíz doble, entonces las soluciones tienen la forma $\exp(r_1x)$ y $x\exp(r_1x)$; si r_2 es una raíz triple, entonces las soluciones tienen la forma $\exp(r_2x), x\exp(r_2x)$ y $x^2\exp(r_2x)$, así sucesivamente.

Usando las ecuaciones diferenciales como guía, buscamos soluciones exponenciales a (1.34) de la forma $a_n = r^n$. Sustituyendo esto en (1.34) da una ecuación polinómica para r

$$r^N + p_{N-1}r^{N-1} + p_{N-2}r^{N-2} + \dots + p_1r + p_0 = 0. \quad (1.35)$$

En general, si las raíces de (1.35) tienen la forma $r_1^n, r_2^n, r_3^n, \dots$, y r_1 es una raíz múltiple entonces las soluciones tienen la forma $r_1^n, nr_1^n, n^2r_1^n, \dots$

Ejemplo 1.11.1.1. Ecuaciones de coeficientes constantes.

(a) Para resolver $a_{n+2} + 3a_{n+1} + 2a_n = 0$ sustituimos $a_n = r^n$ y obtenemos la ecuación polinomial $r^2 + 3r + 2 = 0$. Las raíces de esta ecuación son -1 y -2 . Así, la solución

1.12. FÓRMULAS DE INTERPOLACIÓN DE KOTELNIKOV

25

general es una combinación lineal de $(-1)^n$ y $(-2)^n$: $a_n = c_1(-1)^n + c_2(-2)^n$.

(b) Para resolver un $a_{n+3} - 6a_{n+2} + 12a_{n+1} - 8a_n = 0$ sustituimos r^n por a_n . La ecuación resultante para r es $r^3 - 6r^2 + 12r - 8 = 0$, que tiene una raíz triple en $r = 2$. Así, la solución general tiene la forma $a_n = (c_1 + c_2n + c_3n^2)2^n$.

(c) Para resolver $a_{n+3} + a_{n+2} - a_{n+1} - a_n = 0$ sustituimos $a_n = r^n$. El polinomio resultante en r es $r^3 + r^2 - r - 1 = 0$, cuyas raíces son -1 , -1 , y 1 . Así, la solución general es $a_n = (c_1 + c_2n)(-1)^n + c_3$.

1.12. Fórmulas de interpolación de Kotelnikov

Notemos que $\Psi(x)$ y $V(x) \in L(\mathbf{R})$, ya que $\Psi \in l_2$. En efecto, definamos ψ_N y V_N iguales respectivamente a $\{\psi_j\}$ y $\{V_j\}$ con

$$\psi_j = \begin{cases} \psi_j, & \text{si } |j| \leq 1, \\ 0, & \text{si } |j| > 1. \end{cases} \quad V_j = \begin{cases} V_j, & \text{si } |j| \leq 1, \\ 0 & \text{si } |j| > 1. \end{cases}$$

Sus interpolaciones de Kotelnikov respectivas serían

$$\Psi(x) = (Kot\Psi)(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j \text{senc}\pi(x-j), \quad (1.36)$$

donde

$$\text{senc } x = \begin{cases} 1, & \text{si } x = 0, \\ \frac{\text{senc } x}{x} & \text{si } x \neq 0. \end{cases}$$

Análogamente para V ,

$$V(x) = (KotV)(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j \text{senc}\pi(x-j).$$

Vemos que las transformadas de Fourier de $\Psi(x)$ y $V(x)$ son respectivamente

$$\tilde{\Psi}(x) = (Kot \psi)^{\sim}(p) = \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp}, \quad (1.37)$$

$$\tilde{V}(x) = (Kot V)^{\sim}(p) = \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j e^{-ijp}. \quad (1.38)$$

En efecto

$$\tilde{\Psi}(p) = (Kot \psi)^{\sim}(p) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} [e^{-ijp} (\sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j \text{senc} \pi(x-j))], \quad (1.39)$$

tenemos que si $a, b \in \mathbf{R}$

$$(f(x+a))^{\sim} = e^{iap} \tilde{f}(p),$$

para $f \in L_2(\mathbf{R})$, y que

$$(\text{senc } bx)^{\sim} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{b} \chi_{[-b, b]}(p),$$

donde $\chi_{[-b, b]}$ es la función característica del intervalo $[-b, b]$, vemos que la transformada de Fourier de $\Psi(x)$ de (1.38) es

$$\begin{aligned} (Kot \psi)^{\sim}(p) &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} [e^{-ijp} (\sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j (\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\pi} \chi_{[-\pi, \pi]}(p))] \\ &= \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp}. \end{aligned}$$

Similarmente se comprueba (1.38).

Capítulo 2

Asintótica de la ecuación discreta de Schrödinger

2.1. Lema 2.1.

Consideremos la ecuación discreta de Schrödinger

$$\Psi_{j+1} - (V_j + \beta^2 + 2)\Psi_j + \Psi_{j-1} = 0, \quad (2.1)$$

y sea Ψ_j definida por

$$\Psi(x) = (\text{Kot } \psi)(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \Psi_j \text{sen} \pi(x - j), \quad (2.2)$$

entonces la transformada de Fourier $\tilde{\Psi}(x)$ satisface

$$\tilde{\Psi}(p) = (4\text{sen}^2 p/2 + \beta^2) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}(p - p') \tilde{V}(p') dp'. \quad (2.3)$$

Demostración:

28CAPÍTULO 2. ASINTÓTICA DE LA ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER

$$A_1(x) = -(\Psi(x+1) - 2\Psi(x) + \Psi(x-1)) + \beta^2\Psi(x), \quad (2.4)$$

calculemos la transformada de Fourier de cada una de las componentes de la ecuación anterior.

$$\tilde{\Psi}(p+1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi(x+1)e^{-i(p+1)y} = e^{ip} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi(y)e^{-ipy} = e^{ip}\tilde{\Psi}(p).$$

$$\tilde{\Psi}(p-1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi(x-1)e^{-i(p-1)y} = e^{-ip} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi(y)e^{-ipy} = e^{-ip}\tilde{\Psi}(p).$$

Así (2.4) queda

$$\begin{aligned} \bar{A}_1(p) &= -(e^{ip}\tilde{\Psi}(p) - 2\tilde{\Psi}(p) + e^{-ip}\tilde{\Psi}(p)) + \beta^2\tilde{\Psi}(p) \\ &= [\cos p + i\operatorname{sen} p + \cos(-p) + i\operatorname{sen}(-p) - 2] \tilde{\Psi}(p) \\ &= -(2(\cos p - 1) - \beta^2)\tilde{\Psi}(p). \end{aligned}$$

Por consiguiente

$$\Psi(x) = (Kot \psi)(x) = \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp},$$

2.1. LEMA 2.1.

29

sustituimos esta expresión en el lado derecho (2.4)

$$\begin{aligned}
& (e^{ip} + e^{-ip} - 2 - \beta^2) \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp} \\
&= \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{ip} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp} + e^{-ip} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp} - (2 + \beta^2) \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp} \right] \\
&= \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \left[\sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-i(j-1)p} + \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-i(j+1)p} - (2 + \beta^2) \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp} \right] \\
&= \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \left[\sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_{j+1} e^{-ijp} - 2 \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp} + \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_{j-1} e^{-ijp} \right] \\
&= \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} 2 \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp} \\
&= \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} (\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1} - \beta^2).
\end{aligned}$$

En virtud de (3) la ecuación anterior es

$$\begin{aligned}
& \varepsilon \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j \psi_j e^{-ijp} \\
&= \varepsilon \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum \sum V_j \psi_j e^{-ijp} \\
&= (2\pi) \varepsilon \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum V_j e^{ij(p-p')} \sum \psi_j e^{-ijp'} \\
&= \varepsilon \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int_{-\pi}^{\pi} \sum V_j e^{ij(p-p')} \sum \psi_j e^{-ijp'} dp' \\
&= \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \text{per} K \text{ot} \tilde{V}(p-p') \tilde{\Psi}(p') dp' \\
&= \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}(p-p') \tilde{\Psi}(p') dp'.
\end{aligned}$$

Por consiguiente hemos demostrado que

$$\tilde{\Psi}(p) (4\text{sen}^2 p/2 + \beta^2) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}(p-p') \tilde{\Psi}(p') dp'.$$

2.2. Lema 2.2

Sea $\phi(t)$ una función analítica en t , para $|t| \leq \pi$, entonces cuando $\mu \mapsto +0$

$$\begin{aligned} \mu(1 + \mu^2/4)^{1/2} \int_{[-\pi, \pi]} \frac{\phi(t)dt}{4\text{sen}^2 t/2 + \mu^2} &= \pi\phi(0) + (\pi\phi'(0)i + \frac{1}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\phi(t)dt}{\text{sen}^2 t/2})\mu \\ &\quad - \frac{\pi\phi''(0)\mu^2}{2} + O(\mu^3). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Demostración: Tenemos que

$$\mu(1 + \mu^2/4)^{1/2} \int_{[-\pi, \pi]} \frac{\phi(t)dt}{4\text{sen}^2 t/2 + \mu^2} = \quad (2.6)$$

$$(2.7)$$

$$\mu(1 + \mu^2/4)^{1/2} \left[\int_{\gamma_1} \frac{\phi(t)dt}{\text{sen}^2 t/2} \mu - \int_{\gamma_1} \frac{\phi(t)dt}{\text{sen}^2 t/2} \mu \right], \quad (2.8)$$

donde C_1 denota la frontera del semicírculo unitario contenido en el semiplano complejo superior recorrida en sentido directo.

La función

$$\frac{d(t)}{4\text{sen}^2 t + \mu^2},$$

sólo tiene como singularidad polos simples, a saber, los puntos $\pm t_0 + 2k\pi$, $\forall k \in \mathbf{Z}$,

donde

$$t_0 = -2i \ln\left(-\frac{\mu}{2} + \sqrt{1 + \frac{\mu^2}{4}}\right). \quad (2.9)$$

Como $\mu \mapsto 0$, consideremos

$$\mu < 2\text{sen}1/2, \quad (2.10)$$

2.3. TEOREMA 2.3

31

siendo de esta manera el único polo localizado en el interior del semicírculo mencionado, y de esta forma la integral es igual

$$2\pi i \operatorname{Res}_{z=z_0} \frac{\phi(T)}{4\operatorname{sen}^2 Y + \mu^2}.$$

Consecuentemente

$$\begin{aligned} & \mu(1 + \mu^2/4)^{1/2} \int_{[-\pi, \pi]} \frac{\phi(t) dt}{4\operatorname{sen}^2 t/2 + \mu^2} = \\ & \mu(1 + \mu^2/4)^{1/2} \left[\int_{\gamma_1} \frac{\phi(t) dt}{\operatorname{sen}^2 t/2} \right] \mu \\ & + \mu(1 + \mu^2/4)^{1/2} \frac{\pi}{\mu\sqrt{1 + \mu^2/4}} \phi(i|t_0|), \end{aligned} \quad (2.11)$$

ya que $\operatorname{sen} t/2 \leq |\operatorname{sen} t/2|$ en $1 \leq |t| \leq \pi$, para $t \in \gamma_1$. Reconocemos entonces en el último integrando de (2.11) la serie geométrica convergente respectiva y evaluando el desarrollo finito de McLaurin para ϕ tenemos que

$$\begin{aligned} \mu(1 + \mu^2/4)^{1/2} \int_{[-\pi, \pi]} \frac{\phi(t) dt}{4\operatorname{sen}^2 t/2 + \mu^2} &= \pi\phi(0) + (\pi\phi'(0)i + \frac{1}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\phi(t) dt}{\operatorname{sen}^2 t/2}) \mu \\ &\quad - \frac{\pi\phi''(0)\mu^2}{2} + O(\mu^3). \end{aligned}$$

2.3. Teorema 2.3

1. Sea $\sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j < 0$, entonces el problema posee un valor propio negativo.

$$E = -\varepsilon^2 \beta_0^2 + O(\varepsilon^3), \quad \text{donde} \quad \beta_0 = -\frac{1}{2} \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j. \quad (2.12)$$

32CAPÍTULO 2. ASINTÓTICA DE LA ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER

El vector propio perteneciente a este valor propio esta dado por

$$\psi_j = \frac{\beta^{3/2}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A(p)}{4\text{sen}^2 p/2 + \beta^2} dp, \quad (2.13)$$

donde

$$A(p) = a_0(p) + \varepsilon a_1(p) + \varepsilon^2 a_2(p) + \dots, \quad \beta = \varepsilon(\beta_0 + \varepsilon\beta_1 + \varepsilon^2\beta_2 + \dots), \quad (2.14)$$

$$a_0 = (p) \frac{\chi_{(-\pi, \pi)}(p)}{\sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j} \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j e^{-ijp}, \quad (2.15)$$

$\chi_{(-\pi, \pi)}$ es la función característica de $(-\pi, \pi)$; $\tilde{V}(p) = (KotV)^\sim(p)$ y los valores restantes β_1, β_2, \dots y las funciones a_1, a_2, \dots son determinadas por un sistema recurrente de ecuaciones.

2. Sea $\sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j = 0$, entonces el problema (3) posee un valor propio negativo

$$E = -\varepsilon^4 \beta_0^2 + O(\varepsilon^5), \quad \text{donde} \quad \beta_0 = \frac{1}{16\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{j,k=-\infty}^{\infty} e^{-it(j-k)} \frac{dp}{4\text{sen}^2 p/2}. \quad (2.16)$$

el vector propio perteneciente a estos valores esta dado por (2.13)

$$\beta = \varepsilon(\beta_0 + \varepsilon\beta_1 + \varepsilon^2\beta_2 + \dots), \quad a_0(p) = -\frac{1}{2} \chi_{(-\pi, \pi)}(p) \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j e^{-ijp}. \quad (2.17)$$

y los valores β_1, β_2, \dots y las funciones a_1, a_2, \dots son determinadas por un sistema recurrente de ecuaciones.

Demostración: Sea E negativa pequeña, digamos $E = -\beta^2$, la solución de (3) para $|j| > R$ se da por

$$\psi_j \sim (1 + \beta)^j, \quad j \geq 0$$

2.3. TEOREMA 2.3

33

en efecto de (3), tenemos

$$\psi_{j+1} - (\varepsilon V_j + \beta^2 + 2)\psi_j + \psi_{j-1} = 0, \quad (2.18)$$

que en general es una ecuación de coeficientes variables. Consideremos el caso en que $V_j = -\delta_{j0}$, siendo δ_{jk} la función Delta Kronecker, es decir, V_j es un potencial de pozo discreto que es 0 en todo \mathbf{Z} excepto en el origen, donde tiene profundidad 1. Encontraremos entonces la expresión de la energía en función de la profundidad de U ,

$$p_1 = \beta^2 + 2. \quad (2.19)$$

Escribamos separadamente la ecuación (2.18) para $j = 0$ tenemos que $V = 1$ por consiguiente

$$\psi_{j+1} - (\varepsilon V_j + p_1)\psi_j + \psi_{j-1} = 0, \quad (2.20)$$

ahora para $j \neq 0$, $V = 0$, entonces

$$\psi_{j+1} - p_1\psi_j + \psi_{j-1} = 0, \quad (2.21)$$

y resolvemos independientemente cada ecuación en todo \mathbf{Z} como una ecuación en diferencia lineal y homogénea con coeficientes constantes. De acuerdo a (1.11.1), proponemos para cada una las soluciones $\delta_{0j} = r_0^j$, $\delta_{1j} = r^j$, respectivamente con r_0, r constantes diferente de cero, de allí tenemos

$$r_0^{j+1} + (\varepsilon - p_1)r_0^j + r_0^{j-1} = 0, \quad (2.22)$$

$$r^{j+1} + p_1r^j + r^{j-1} = 0. \quad (2.23)$$

34CAPÍTULO 2. ASINTÓTICA DE LA ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER

O

$$r_0^{j-1}(r_0^2 + (\varepsilon - p_1)r_0 + 1) = 0,$$

$$r^{j-1}(r^2 - p_1r + 1) = 0.$$

como r_0 y r son constantes diferentes de cero luego las soluciones algebraicas para estas son:

$$r_{i;\pm} = \frac{p_1 - \varepsilon + \sqrt{(\varepsilon - p_1)^2 - 4}}{2} = \frac{p_1 - \varepsilon}{2} + \sqrt{\frac{(p_1 - \varepsilon)^2}{4} - 1}, \quad (2.24)$$

$$r_{i;\pm} = \frac{p_1 + \sqrt{p_1^2 - 4}}{2} = \frac{p_1}{2} + \sqrt{\frac{p_1^2}{4} - 1}, \quad (2.25)$$

en donde las soluciones generales de las ecuaciones (2.20) y (2.21) son respectivamente

$$\psi_{0j} = A_0 r_{i,+}^j + B_0 r_{0,-}^j, \quad j = 0, \quad (2.26)$$

$$\psi_{1j} = A_0 r_{i,+}^j + B_0 r_{0,-}^j, \quad j \neq 0. \quad (2.27)$$

Para constantes arbitrarias A_0, B_0, A, B . Consideremos entonces la solución general de (2.18) con $V_j = -\delta_{j0}$ como la formada por las soluciones (2.20) y (2.21) en los respectivos subconjuntos $\{0\}$ y $\mathbf{Z}\{0\}$, donde la ecuación (2.18) coincide con cada una de las ecuaciones (2.20) y (2.21); dicha solución la podemos expresar

$$\psi_j = \delta_{0j} \psi_{0j} + \psi_{0j}. \quad (2.28)$$

Como la solución $\Psi = \{\psi_j\}$ debe estar en l_2 , tenemos que modificar las constantes arbitrarias de (2.36) en forma distinta para cada intervalo discreto $\mathbf{Z}^-, 0, \mathbf{Z}^+$, haciendo $B = 0$, para $j \leq -1$ y $A = 0$ para $j \geq -1$; así sucede que

$$\psi_j = \begin{cases} Ar_+^j, & \text{si } j \leq -1, \\ C, & \text{si } j = 0, \\ Br_-^j, & \text{si } j \geq 1. \end{cases}$$

2.3. TEOREMA 2.3

35

De este modo tenemos

$$\psi_{-2} = Ar_+^{-2}, \quad \psi_{-1} = Ar_+^{-1}, \quad \psi_0 = C, \quad \psi_1 = Br_+, \quad \psi_2 = Br_+^2. \quad (2.29)$$

Ahora peguemos los tres pedazos anteriores, observando que la solución debe cumplirse en particular cuando uno de los subíndices de (2.33) para $j = -1, j = 0, j = 1$, lo que nos da respectivamente

$$\psi_0 - p_1\psi_{-1} + \psi_{-2} = 0 \quad (2.30)$$

$$\psi_1 + (\varepsilon - p_1)\psi_0 + \psi_{-1} = 0 \quad (2.31)$$

$$\psi_2 - p_1\psi_1 + \psi_0 = 0, \quad (2.32)$$

sustituyendo las ψ_j en las ecuaciones (2.30), estas se transforman en

$$C - p_1Ar_+^{-1} + Ar_+^{-2} = 0, \quad (2.33)$$

$$B + (\varepsilon - p_1)C + Ar_+^{-1} = 0, \quad (2.34)$$

$$Br_+^2 - p_1Br_+ + C = 0. \quad (2.35)$$

Si el sistema (2.30) tiene soluciones no triviales para A, B y C (y por lo tanto existe Ψ no trivial) entonces su determinante

$$\begin{vmatrix} -p_1r_+^{-1} + r_+^{-2} & 0 & 1 \\ r_+^{-1} & r_- & \varepsilon - p_1 \\ 0 & r_-^{-1} - p_1r_- & 1 \end{vmatrix}$$

que es igual a cero nos proporciona la ecuación

$$(r_+^{-2} - p_1r_+^{-1})r_- + r_+^{-1}(r_-^2 - p_1r_-) + (r_+^{-2} - p_1r_+^{-1})(-\varepsilon + p_1)(r_-^2 - p_1r_-) = 0,$$

notemos que $r_+r_- = 1, r_+ + r_- = p_1$ resolviendo lo anterior tenemos

$$r_+^{-2}r_- - p_1r_+^{-1}r_- + r_+^{-1}r_-^2 - p_1r_+^{-1}r_- +$$

36 CAPÍTULO 2. ASINTÓTICA DE LA ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER

$$[(r_+^{-2}r_-^2 - p_1r_+^{-2}r_- - p_1r_+^{-1}r_-^2 + p_1^2r_+^{-1}r_-)(-\varepsilon + p_1)] = 0,$$

$$2r_+^{-1}(-p_1r_- + r_-^2) +$$

$$[r_+^{-2}r_-^2 - r_+^{-2} - r_+^{-2}r_-^2 - r_+^{-2} - r_+^{-2}r_-^2 + r_+^{-2}r_-^2 + 2r_+^{-2} + r_+r_-)(-\varepsilon + p_1)] = 0,$$

así

$$2r_+^{-1}(-r_+r_- - r_-^2 + r_-^2) + (-\varepsilon + p_1) = 0,$$

por tanto

$$-2r_+^{-1} - \varepsilon + p_1 = 0.$$

Por (2.19) podemos escribir esta última ecuación como

$$-\frac{2}{\frac{p_1}{2} + \sqrt{\frac{p_1^2}{4} - 1}} - \varepsilon + p_1 = 0, \quad (2.36)$$

que por (2.19) escribimos a su vez como

$$\begin{aligned} &-\frac{2}{\frac{\beta^2+2}{2} + \sqrt{\frac{(\beta^2+2)^2}{4} - 1}} - \varepsilon + p_1 = \\ &-\frac{2}{\frac{\beta^2}{2} + 1 + \sqrt{\frac{\beta^2(\beta^2+4)}{4}}} - \varepsilon + p_1, \end{aligned}$$

por consiguiente

$$\frac{2}{\frac{\beta^2}{2} + 1 + \beta\sqrt{\frac{\beta^2}{4} + 1}} - \varepsilon + p_1 = 0. \quad (2.37)$$

Ahora como

$$\sqrt{1 + \frac{\beta^2}{4}} = 1 + \frac{\beta^2}{8} + O(\beta^2),$$

tenemos sucesivamente de (2.36)

$$\frac{-2}{1 + \beta + O(\beta^2)} - \varepsilon + O(\beta^2) + 2 = 0,$$

2.3. TEOREMA 2.3

37

o

$$-2(1 - \beta + O(\beta^2)) - \varepsilon + O(\beta^2) + 2 = 0.$$

Eliminando los términos de orden $O(\beta^2)$ ya que $\beta \rightarrow 0$ resulta

$$\beta = \frac{\varepsilon}{2},$$

que nos da la relación entre β y ε . Vemos entonces que E es de orden de ε^2 .

Interpolando el problema (2.18) a todo el eje. Construimos la interpolación $\Psi(x)$ de la función de onda de red dada Ψ .

Usando las fórmulas de Kotelnikov de (1.36)

$$\Psi(x) = (\text{Kot} \Psi)(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j \text{senc} \pi(x - j),$$

y análogamente para $V(x)$ note que $\Psi(x) \in L_2(-\infty, \infty)$, si

$\Psi \in l_2$ y de

$$\tilde{\Psi}(x) = (\text{Kot} \psi)^{\sim}(p) = \frac{\chi_{[-\pi, \pi]}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ijp}.$$

Así (3) nos queda como

$$-(\Psi(x+1) - 2\Psi(x) + \Psi(x-1)) + \varepsilon\Psi(x) = -E\Psi(x). \quad (2.38)$$

Aplicando transformada de Fourier tenemos que en virtud del lema 2.1

$$\tilde{\Psi}(p)(4\text{senc}^2 p/2 + \beta^2) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}(p-p') \tilde{\Psi}(p') dp',$$

Aquí, la integración es de $-\pi$ a π , por que el soporte de la transformada de Fourier $\frac{\text{senc}(x-x_j)}{\pi(x-x_j)}$ pertenece a este intervalo. Así Ψ es casi constante, su transformada de Fourier es una sucesión δ -tipo cuando $\beta \rightarrow 0$, por tanto haciendo $u = p - p'$ luego $p = p' - u$

38CAPÍTULO 2. ASINTÓTICA DE LA ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER

y $dp' = -du$, entonces

$$\begin{aligned}\tilde{\Psi}(p)(4\text{sen}^2 p/2 + \beta^2) &= -\frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}(u)\tilde{\Psi}(p-u)du \\ &= -\frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \Psi(p).\end{aligned}$$

por tanto $\tilde{\Psi}(p) \sim \frac{\Psi(p)}{4\text{sen}^2 p/2 + \beta^2}$.

Así es natural mirar la transformada de Fourier Ψ en la forma

$$\tilde{\Psi}(p) = \beta^{3/2} \frac{a_0(p) + \varepsilon a_1(p) + \dots}{4\text{sen}^2 p/2 + \varepsilon^2 B_n^2}, \quad \text{donde } \beta = \varepsilon\beta_0 + \varepsilon^2\beta_1 + \dots \quad (2.39)$$

De acuerdo al esquema anterior, miraremos la solución aproximada de la ecuación (2.3) en la forma

$$\tilde{\Psi}_N(p) = \varepsilon B_n C(\varepsilon) \frac{A_n(p)}{4\text{sen}^2 p/2 + \varepsilon^2 B_n^2}, \quad A_n(p) = a_0(p) + \dots + \varepsilon^n a_n(p), \quad (2.40)$$

donde $C(\varepsilon)$ es una constante normalizada. Supongamos que $a_0(p) \neq 0$ y

$$B_n = \beta_0 + \varepsilon\beta_1 + \dots + \varepsilon^n B_n. \quad (2.41)$$

El nivel de energía aproximado es $E_n = -\varepsilon^2 B_n$, miraremos que la solución satisface las condiciones de normalización

$$a_0 = 1, \quad a_k(0) = 0, \quad k = 2, \dots, n \quad (2.42)$$

Nuestro objetivo es construir tales valores de $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$ y las funciones $a_0(p), \dots, a_n(p)$ de modo que $\tilde{\Psi}(p)$ que satisface la ecuación (2.3) hasta $O(\varepsilon^{n+1})$, donde $\|O(\varepsilon^{n+1})\|_{L_2} \leq \text{Const} \varepsilon^{n+1}$. Posteriormente sustituyendo (2.28) y (2.29) en (2.3), tenemos que

$$\varepsilon B_n C(\varepsilon) \frac{A_n(p)}{4\text{sen}^2 p/2 + \varepsilon^2 B_n^2} (4\text{sen}^2 p/2 + \varepsilon^2 B_n^2) =$$

2.3. TEOREMA 2.3

39

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}(p-p') \frac{\varepsilon B_n C(\varepsilon) A_n(p')}{4s \varepsilon n p' / 2 + \varepsilon^2 B_n^2} dp' &= \\ \frac{\varepsilon B_n C(\varepsilon) A_n(p)}{\varepsilon B_n C(\varepsilon)} &= \\ \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}(p-p') \tilde{\Psi}(p') dp' &. \end{aligned}$$

Por consiguiente hemos obtenido una ecuación equivalente

$$A_n(p) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}(p-p') \tilde{\Psi}(p') dp'. \quad (2.43)$$

En virtud del lema 2.2 de la expansión asintóticas de la forma

$$\int_{[-\pi, \pi]} \frac{\phi(t)}{4s \varepsilon n^2 \frac{t}{2} + \mu^2} dt. \quad (2.44)$$

cuando $\mu \rightarrow 0$, donde $\phi(t)$ es una función analítica en t para $|t| \leq \pi$. Introduzcamos el contorno en el plano complejo \mathbf{C}

$$\gamma_1 = [-\pi, -1] \cup \{x + iy : x^2 + y^2 = 1, |x| \leq 1, y > 0\} \cup [1, \pi].$$

Sustituyendo en el lema, $\mu = \varepsilon B_n$, $\phi(t) = \tilde{V}(p-t)A_n(t)$ y calculando los coeficientes $\varepsilon^0, \varepsilon^1, \varepsilon^2, \dots$ tenemos:

$$\begin{aligned} \varepsilon B_n (1 + \varepsilon^2 B_n^2 / 4)^{1/2} \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\tilde{V}(p-t)A_n(t)dt}{4s \varepsilon n^2 \frac{t}{2} + \varepsilon^2 B_n^2} \\ = (\tilde{V}(p-t))'_t = -\tilde{V}'_{\xi}(\xi) |_{\xi=p-t} = -\tilde{V}'(p-t) \\ (\tilde{V}(p-t))_t^{(j)} = (-1)^j \tilde{V}^{(j)}(p-t) \\ A_n^{(k)}(t) = \sum_{l=0}^n a_l^k(t) \varepsilon^l. \end{aligned}$$

Luego

$$\phi(t) = \tilde{V}'(p-t)A_n(t),$$

40CAPÍTULO 2. ASINTÓTICA DE LA ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER

entonces

$$\phi(0) = \tilde{V}'(p)A_n(0),$$

$$\phi'(t) = -\tilde{V}'(p-t)A_n(t) + \tilde{V}(p-t)\sum_{l=0}^n a_l'(t)\varepsilon^l.$$

Así

$$\phi'(0) = -\tilde{V}'(p)A_n(0) + \tilde{V}(p)\sum_{l=0}^n a_l'(0)\varepsilon^l.$$

Además

$$\begin{aligned} \phi''(t) &= -\tilde{V}''(p-t)A_n(t) - \tilde{V}'(p-t)\sum_{l=0}^n a_l'(t)\varepsilon^l, \\ &\quad - \tilde{V}'(p-t)\sum_{l=0}^n a_l'(t)\varepsilon^l + \tilde{V}(p-t)\sum_{l=0}^n a_l''(t)\varepsilon^l. \end{aligned}$$

2.3. TEOREMA 2.3

41

Por tanto

$$\begin{aligned}
\phi''(0) &= -\tilde{V}''(p)A_n(0) - \tilde{V}'(p)\sum_{l=0}^n a_l'(0)\varepsilon^l, \\
&- \tilde{V}'(p)\sum_{l=0}^n a_l'(0)\varepsilon^l + \tilde{V}(p)\sum_{l=0}^n a_l''(0)\varepsilon^l \\
&\varepsilon B_n(1 + \varepsilon^2 B_n^2/4)^{1/2} \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\tilde{V}(p-t)A_n(t)dt}{4\operatorname{sen}^2 \frac{t}{2} + \varepsilon^2 B_n^2} \\
&= \pi \tilde{V}(p)A_n(0) + [\pi \phi'(0)i + \frac{1}{4} \int_{[-\pi, \pi]} \frac{\pi \tilde{V}(p-t)A_n(t)dt}{\operatorname{sen}^2 t/2}] \varepsilon B_n \\
&- \frac{\pi}{2} \phi''(0) \varepsilon^2 B_n^2 + O(\mu^3) \\
&= \pi \tilde{V}(p)a_0(0) + \dots + \pi \tilde{V}(p)a_n(0)\varepsilon^n + \varepsilon \pi [(\beta_0 + \dots + \varepsilon^n \beta_n) \{-\tilde{V}'(p)A_n(0)i \\
&+ \tilde{V}(p)\sum_{l=0}^n a_l'(0)\varepsilon^l\}] + \frac{\varepsilon(\beta_0 + \dots + \varepsilon^n \beta_n)}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t)[a_0(t) + \dots + a_n(t)\varepsilon^n]}{\operatorname{sen}^2 t/2} dt \\
&- \frac{\pi}{2} \{ \tilde{V}''(p)A_n(0) - \tilde{V}'(p)\sum_{l=0}^n a_l'(0)\varepsilon^l - \tilde{V}'(p)\sum_{l=0}^n a_l'(0)\varepsilon^l \\
&+ \tilde{V}(p)\sum_{l=0}^n a_l''(0)\varepsilon^l \} \varepsilon^2 B_n^2 + O(\mu^3)
\end{aligned}$$

42CAPÍTULO 2. ASINTÓTICA DE LA ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER

$$= \pi \tilde{V}(p) a_0(0) + \dots + \pi \tilde{V}(p) a_n(0) \varepsilon^n + \varepsilon \pi [(\beta_0 + \dots + \varepsilon^n \beta_n) (-\tilde{V}'(p) A_n(0) i)$$

$$+ \varepsilon \pi (\beta_0 + \dots + \varepsilon^n \beta_n) \tilde{V}(p) \sum_{l=0}^n a_l'(0) \varepsilon^l] + \frac{\varepsilon (\beta_0 + \dots + \varepsilon^n \beta_n)}{4}$$

$$X \left\{ \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_0(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt + \dots + \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_n(t) \varepsilon^n}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt \right\}$$

$$- \left[\frac{\pi}{2} \{ \tilde{V}''(p) a_0(0) + \dots + \tilde{V}''(p) a_n(0) \varepsilon^n - \tilde{V}'(p) a_0'(0) - \dots - \tilde{V}'(p) a_n'(0) \varepsilon^n \right.$$

$$\left. - \tilde{V}'(p) a_0'(0) - \dots - \tilde{V}'(p) a_n'(0) \varepsilon^n + \tilde{V}(p) a_0''(0) + \dots + \tilde{V}(p) a_n''(0) \varepsilon^n \} \right] \varepsilon^2 B_n^2$$

$$O(\varepsilon^3 B_n^3) =$$

$$\pi \tilde{V}(p) a_0(0) + \pi \tilde{V}(p) a_1(0) \varepsilon + \pi \tilde{V}(p) a_2(0) \varepsilon^2 + \dots + \pi \tilde{V}(p) a_n(0) \varepsilon^n$$

$$- \varepsilon \pi \tilde{V}'(p) \beta_0 a_0(0) i - \varepsilon^2 \pi \tilde{V}'(p) \beta_0 a_1(0) i - \dots - \varepsilon^{n+1} \pi \tilde{V}'(p) \beta_0 a_n(0) i$$

$$- \varepsilon^3 \pi \tilde{V}'(p) \beta_1 a_n(0) i - \varepsilon^{n+1} \pi \tilde{V}'(p) \beta_n a_0(0) i - \dots - \varepsilon^2 \pi \tilde{V}'(p) \beta_n a_1(0) i$$

$$- \dots - \varepsilon^{2n+1} \pi \tilde{V}'(p) \beta_n a_n(0) i + \varepsilon \pi \tilde{V}(p) \beta_0^2 a_0'(0) + \varepsilon^2 \pi \tilde{V}(p) \beta_0^2 a_1'(0)$$

$$+ \dots + \varepsilon^{n+1} \pi \tilde{V}(p) \beta_0^2 a_n'(0) + \varepsilon^2 \pi \tilde{V}(p) \beta_1 a_0'(0) + \varepsilon^3 \pi \tilde{V}(p) \beta_1 a_1'(0)$$

2.3. TEOREMA 2.3

43

$$\begin{aligned}
& + \dots + \varepsilon^{n+1} \pi \tilde{V}(p) \beta_1 a'_n(0) + \varepsilon^{n+1} \pi \tilde{V}(p) \beta_n a'_n(0) + \varepsilon^{n+1} \pi \tilde{V}(p) \beta_0 a'_1(0) \\
& + \dots + \varepsilon^{2n+1} \pi \tilde{V}(p) \beta_n a'_n(0) + \frac{\varepsilon \beta_0}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_0(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt + \frac{\varepsilon^2 \beta_0}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_1(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt \\
& + \dots + \frac{\varepsilon^{n+1} \beta_1}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_n(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt + \frac{\varepsilon^3 \beta_1}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_1(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt \\
& + \frac{\varepsilon^3 \beta_1}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_1(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt + \dots + \frac{\varepsilon^{n+2} \beta_0}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_n(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt \\
& + \dots + \frac{\varepsilon^{n+2} \beta_0}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_n(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt + \dots + \frac{\varepsilon^n \beta_n}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_0(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt \\
& + \frac{\varepsilon^{n+1} \beta_n}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_1(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt + \dots + \frac{\varepsilon^{2n} \beta_2}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t) a_n(t)}{\operatorname{sen}^{t/2}} dt \\
& + \left[\frac{\pi}{2} \tilde{V}'(p) a'_0(0) + \frac{\pi}{2} \tilde{V}'(p) \varepsilon a'_1(0) + \dots + \frac{\pi}{2} \tilde{V}'(p) \varepsilon^n a'_n(0) - \frac{\pi}{2} \tilde{V}'(p) a''_0(0) \right. \\
& \left. - \frac{\pi}{2} \tilde{V}'(p) \varepsilon a''_0(0) - \dots - \frac{\pi}{2} \tilde{V}'(p) a''_0(0) + \frac{\pi}{2} \tilde{V}''(p) a_0(0) + \frac{\pi}{2} \tilde{V}''(p) \varepsilon a_1(0) \right. \\
& \left. + \dots + \frac{\pi}{2} \tilde{V}''(p) \varepsilon^n a_n(0) + \frac{\pi}{2} \tilde{V}'(p) a'_0(0) + \dots + \frac{\pi}{2} \tilde{V}'(p) \varepsilon^n a'_n(0) \right] \varepsilon^2 B_n^2 \\
& = \pi \tilde{V}'(p) a_0(p) - \varepsilon \pi \left\{ \beta_0 [a_0(0) i \tilde{V}'(p) - a'_0(0) V(p) - \frac{1}{4\pi} \int_{\gamma_1} \tilde{V}'(p-t) a_0(t) dt] \right.
\end{aligned}$$

44CAPÍTULO 2. ASINTÓTICA DE LA ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER

$$\begin{aligned}
& - a_1(0)\tilde{V}'(p)\} - \varepsilon^2\pi\{\beta_0[a_1(0)i\tilde{V}'(p) - a_1(0)\tilde{V}(p) - \frac{1}{4\pi}\int_{\gamma_1}\tilde{V}'(p-t)a_0(t)dt] \\
& - a_2(0)\tilde{V}'(p)\} + \dots + .
\end{aligned}$$

Luego

$$\begin{aligned}
& \varepsilon B_n(1 + \varepsilon^2 B_n^2/4)^{1/2} \int_{[-\pi, \pi]} \frac{\tilde{V}(p-t)A_n t}{4\text{sen}^2 t/2 + \varepsilon^2 B_n} dt = \\
& \pi\tilde{V}'(p)A_n(0) - \varepsilon\pi\{\beta_0[a_0(0)i\tilde{V}'(p) - a'_0(0)V(p) - \frac{1}{4\pi}\int_{\gamma_1}\tilde{V}'(p-t)a_0(t)dt] \\
& - a_1(0)\tilde{V}'(p)\} - \varepsilon^2\pi\{\beta_0[a_1(0)i\tilde{V}'(p) - a_1(0)\tilde{V}(p) - \frac{1}{4\pi}\int_{\gamma_1}\tilde{V}'(p-t)a_0(t)dt] \\
& - a_2(0)\tilde{V}'(p)\} + \dots + .
\end{aligned}$$

Multiplicando la expresión obtenida por $\frac{-\varepsilon}{\sqrt{2\pi}}$ se tiene

$$\begin{aligned}
& \frac{B_n \varepsilon^2}{\sqrt{2\pi}}(1 + \varepsilon^2 B_n^2/4)^{1/2} \int_{[-\pi, \pi]} \frac{\tilde{V}(p-t)A_n t}{4\text{sen}^2 t/2 + \varepsilon^2 B_n} dt = \\
& \frac{-\pi\tilde{V}'(p)A_n(p)\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} + \frac{\varepsilon^2\pi}{\sqrt{2\pi}}\{\beta_0[a_0(0)i\tilde{V}'(p) - a'_0(0)V(p) - \frac{1}{4\pi}\int_{\gamma_1}\tilde{V}'(p-t)a_0(t)dt] \\
& - a_1(0)\tilde{V}'(p)\} - \varepsilon^2\pi\{\beta_0[a_1(0)i\tilde{V}'(p) - a_1(0)\tilde{V}(p) - \frac{1}{4\pi}\int_{\gamma_1}\tilde{V}'(p-t)a_0(t)dt] \\
& - a_2(0)\tilde{V}'(p)\} + \dots + .
\end{aligned}$$

46CAPÍTULO 2. ASINTÓTICA DE LA ECUACIÓN DISCRETA DE SCHRÖDINGER

Sea $p = 0$ en (2.46), por la fórmula para $a_0(p)$ y la condición $a_1(0) = 0$, obtenemos

$$\begin{aligned} & -\sqrt{\pi/2}\tilde{V}(0)a_1(p) + \beta_1 a_0(p) = \\ & \sqrt{\pi/2}\{-\sqrt{\pi/2}\tilde{V}(0)[i\tilde{V}'(p) - \frac{1}{4}\int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t)\tilde{V}(t)}{\tilde{V}(0)\text{sen}^2 t/2} dt]\} = \\ & \sqrt{\pi/2}\{-\sqrt{\pi/2}\tilde{V}(0)[i\tilde{V}'(p) - \frac{1}{4\tilde{V}(0)}\int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(-t)\tilde{V}(t)}{\text{sen}^2 t/2} dt]\}. \end{aligned}$$

Así

$$\beta_1 = -\frac{\pi}{2}\tilde{V}(0)\tilde{V}'(0) + \frac{1}{8}\int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(-t)\tilde{V}(t)}{\text{sen}^2 t/2} dt. \quad (2.47)$$

Halleamos $a_1(p)$. Sustituyendo en (2.46) a_0, β_0 y β_1 y tomando en cuenta que $a_0(0)$

$$\begin{aligned} \beta_0 a_1(p) &= -\beta_1 a_0(p) + \sqrt{\pi/2}\{\beta_0[i a_0(0)\tilde{V}'(p) - i a'(0)\tilde{V}'(p)] \\ & - \frac{1}{4\pi}\int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t)}{\text{sen}^2 t/2} a_0(t) dt] - a_0(0)\tilde{V}(p)\}, \\ a_1(0) &= \frac{-\beta_1 a_0(p)}{\beta_0} + \sqrt{\pi/2}\frac{1}{\beta_0}\{\beta_0[i a_0(0)\tilde{V}'(p) - i a'(0)\tilde{V}'(p)] \\ & - \frac{1}{4\pi}\int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t)}{\text{sen}^2 t/2} a_0(t) dt] - a_0(0)\tilde{V}(p)\} \\ &= \frac{-\tilde{V}(p)\int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t)}{\text{sen}^2 t/2} a_0(t) dt}{-\sqrt{\pi/2}\tilde{V}(p)} + \sqrt{\pi/2}\{i a_0(0)\tilde{V}'(p) - i a'_0(0)\tilde{V}'(p) \\ & - \frac{1}{4\pi}\int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t)}{\text{sen}^2 t/2} a_0(t) dt] - a_0(0)\tilde{V}(p)\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_1(p) &= \frac{\tilde{V}(p)}{4\sqrt{2\pi}\tilde{V}^2(0)} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(-t)\tilde{V}(t)}{\operatorname{sen}^2 t/2} dt + \sqrt{\pi/2}i\tilde{V}'(p) - \sqrt{\pi/2}i \frac{\tilde{V}'(0)\tilde{V}(p)}{\tilde{V}(0)} \\
&\quad - \sqrt{\pi/2} \frac{1}{4\pi\tilde{V}(0)} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t)\tilde{V}(t)}{\operatorname{sen}^2 t/2} dt \\
&= \frac{\tilde{V}(p)}{4\sqrt{2\pi}\tilde{V}^2(0)} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(-t)\tilde{V}(t)}{\operatorname{sen}^2 t/2} dt + \sqrt{\pi/2} \frac{i}{\tilde{V}(0)} [\tilde{V}'(p)\tilde{V}(0) - \tilde{V}'(0)\tilde{V}(p)] \\
&\quad - \frac{1}{4\sqrt{2\pi}\tilde{V}(0)} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(-t)\tilde{V}(t)}{\operatorname{sen}^2 t/2} dt \\
&= \sqrt{\pi/2} \frac{i}{\tilde{V}(0)} [\tilde{V}'(p)\tilde{V}(0) - \tilde{V}'(0)\tilde{V}(p)] - \frac{1}{4\sqrt{2\pi}\tilde{V}(0)} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(-t)\tilde{V}(t)}{\operatorname{sen}^2 t/2} dt \\
&\quad + \frac{\tilde{V}(p)}{4\sqrt{2\pi}\tilde{V}^2(0)} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(-t)\tilde{V}(t)}{\operatorname{sen}^2 t/2} dt. \tag{2.48}
\end{aligned}$$

Vemos que $a_1(0) = 0$, procediendo análogamente, obtenemos β_n y a_n , suponiendo que $\beta_0, \beta_1, \dots, a_0, a_1, \dots$ son conocidos y que $a_k(0) = 0$, $k = 2, \dots$, y tomando para $a_n(p)$ tal que $a_n(0) = 0$ las aproximaciones a los valores pares que tenemos es cercana a la exacta y esto finaliza la prueba \blacklozenge

Bibliografía

- [1] P. Zhevandrov, A. Merzon, *Shallow potential wells for the discrete Schrödinger equation* Morfismos, (2002).
- [2] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, H. Holden, *Solvable models in Quantum Mechanics*, (Springer, 1988).
- [3] M. V. Fedoryuk, *Asymptotics integrals and Series*, (Nauka, Moscow, 1987) .
- [4] R. Gadyl'shin, *Teor. Mat. Fiz*, vol. 132, págs. 97–104, (2002).
- [5] Landau, L. D, and Lifschitz, E. M, *Quantum Mechanics* Pergamon, London, (1958).
- [6] Maslov, V. P, *Asymptotic methods and theory of perturbations*, Nauka, Moscow, (1988).
- [7] Simon, B, The bound state of weakly coupled Schrödinger operators in one and two-dimensions, *Ann. Phys. (NY)*, 97, pp. 279-278, (1976).
- [8] P. Zhevandrov, P, and Merzon, A, *Asimptotics of eigenfunctions in shallow potential wells and related problems*, *Amer. Math. Soc. Translations (2)* 208, pp. 235-284, (2003).