RESONANCIA DE UNA FUNCIÓN DE ONDA DESCRITA POR LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA UN POTENCIAL REGULAR

EILBERH ENRIQUE CARO ZUÑIGA



UNIVERSIDAD DE CARTAGENA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES PROGRAMA DE MAESTRIA EN MATEMATICAS CARTAGENA DE INDIAS, COLOMBIA 2017

RESONANCIA DE UNA FUNCIÓN DE ONDA DESCRITA POR LA ECUACIÓN SCHRÖDINGER PARA UN POTENCIAL REGULAR

EILBERH ENRIQUE CARO ZUÑIGA

TRABAJO PRESENTADO COMO REQUISITO PARA OBTENER EL TITULO DE MAESTRIA EN MATEMATICAS

DIRECTOR DE TESIS PhD. ANA MAGNOLIA MARIN RAMIREZ CODIRECTOR DE TESIS PhD. RUBEN DARIO ORTIZ ORTIZ



UNIVERSIDAD DE CARTAGENA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES PROGRAMA DE MAESTRIA EN MATEMATICAS CARTAGENA DE INDIAS, COLOMBIA 2017

$Dedicado \ a$

mi hijo Iker Andres Caro Santoya, mi esposa Jennifer Santoya Girado mis padres Elizabeth Zuñiga Benadives, Justino Caro Baños.

Agradecimientos

¡Muchas gracias a Dios que me ha permitido concluir el objetivo, a mi familia por contar siempre con ellos, a mis profesores Ana Magnolia Marin y Ruben Dario Ortiz por su contribución y apoyo!

Resumen

En este trabajo se construye la resonancia de la función de onda asociada por la ecuación de Schrödinger en el caso continúo y discreto para una barrera de potencial regular, para el caso continuo utilizaremos la función Green, la transforma de Fourier y la serie de Neumann para resolver el problema. Para el discreto utilizaremos la interpolación de Whittaker-Kotelnikov.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	IV
Introducción	VI
1. Resonancia Caso Continuo	1
1.1. Ecuación Unidimensional de Schrödinger	1
1.2. Operadores	4
1.2.1. Series de Neumann	7
1.2.2. Transformada de Fourier	8
1.2.3. Valores Propios	11
1.2.4. Función Delta de Dirac	16
1.3. Función de Green para la ecuación Schrödinger	18
1.4. Resonancia	19
2. Resonancia Discreta	24
2.1. Ecuación Discreta de Schrödinger	24
2.2. Interpolación en el Caso Discreto	25
2.2.1. Espectro en el Caso Discreto	29
3. Comparacion entre el Caso Continuo y Discreto	36
Bibliografía	41

Introducción

A principios del siglo XIX surgieron una serie de fenómenos y experimentos cuyos resultados no pudieron ser explicados por las teorías existentes, en el caso de las leyes físicas conocidas hasta entonces eran aplicables a cierto tipos de sistemas y con condiciones muy restringidas. Entonces fue necesario establecer una nueva teoría que modificara conceptos y crear nuevas ideas. Así, el postulado más importante resulto ser la ecuación Schrödinger, la cual está dada:

$$(-\Delta + V(x))\psi(x,t) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t).$$
(1)

La ecuación (1) es uno de los pilares de la física contemporánea y es llamada la "ley de la dinamica" que obedece a los sistemas cuánticos a bajas energías. La construcción de las soluciones $\psi(x,t)$ de esta ecuación que son funciones complejas, son llamadas funciones de ondas que tienen validez en el estudio de los sistemas cuánticos, donde V(x) es una función real que se carecteriza por ser una función potencial o un campo de fuerza potenciales. En el transcurso del tiempo se han establecidos diferentes criterios de aproximación de estas soluciones, entre estos muy conocidos estan el método variacional y el WBK. Una técnica normal para resolverla ecuación (1) es proponer que la soluciones se puedan separar las variables, entonces se transforma la ecuación (1) de la siguiente forma

$$-\Delta\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x), \qquad (2)$$

que es llamada ecuación de Schrödinger estacionaria o independiente del tiempo, donde V(x) es de soporte compacto, es decir, que $V(x) \in C_0^{\infty}(\mathbb{R})$, consideremos que es una

barrera de potencia, esto es, que $\int V(x)dx > 0$ y E es una constante que representa la energía del sistema. Los valores de la energía que resultan seleccionados se denominan valores propios, y las correspondientes soluciones se nombran funciones propias. Los valores de E pueden resultar discretos o continuos en determinados intervalos. Determinar los valores reales de E que satisface la ecuación (2), nos permite identificar estados de energía de una partícula cuantíca y bajo cierta condiciones descomponer el operador Hamiltoniano $H = -\Delta + V$.

La ecuación estacionaria de Schrödinger permite encontrar todos los estados estacionarios del sistema, no obstante, deben imponerse algunas condiciones complementarias en el infinito y en los puntos singulares del potencial V(x) acordes con el significado físico de la función de onda. Esto trae como resultados que en general no todos los posible valores de la energía sean permitidos, similar como ocurre con las frecuencias propias de una cuerda con sus extremos fijos. De esta forma la ecuación (1) garantiza la cuantización de la energía y los valores que selecciona corresponden a las energías de los estados estacionarios. La cuantización de la energía surge como consecuencia de las condiciones complementarias que se le imponen a la función de onda. La función de onda y sus primeras derivadas espaciales deben ser, funciones continuas, uní evaluadas y finitas en todos los puntos del espacio, incluso en aquellos puntos, líneas o superficie donde el potencial V(x) es una función discontinua.

La construcción de las soluciones de la ecuación (2) se remontan a 1958 en el libro de Landau and Lisfhsitz (ver [6]) donde se imponen las primeras condiciones para solucionar el problema, luego en 1976 buscando soluciones φ tales que $\varphi \in L_2(\mathbb{R})$, se demuestra que cuando el problema es homogéneo este posee un espectro continuo que coincide con el intervalo $[0, \infty)$, si $\int V(x)dx < 0$ la distancia que hay del valor propio al espectro continuo es de orden ε^2 y cuando $\int V(x)dx = 0$ tiene orden ε^4 (ver [18], [22]). Lamentablemente para una familia extensa de funciones V el problema de valores propios planteado en la ecuación (2) no admite soluciones cuadrado intregrales. En este trabajo consideremos que V es de soporte compacto, es decir, que $V \in C_0^{\infty}(\mathbb{R})$ y el concepto de resonancia referente a la frecuencias dispersivas que hace relación a las soluciones de la ecuación de Schrödinger cuyo comportamiento asintótico es de crecimiento exponencial con el objetivo de encontrar resonancia para la ecuación de Schrödinger de una barrera de potencia regular para el caso continuo y discreto.

Para llegar al objetivo de este trabajo, en el primer capítulo presentaremos algunos resultados conocidos de la ecuación de Schrödinger, tales como el operador Halmiltoniano asociado a la ecuación Schrödinger de la cual encontramos el valor propio del operador Halmiltoniano, se aplica la función de Green ala ecuación de Schrödinger, se define el concepto de resonancia desde el punto de vista de frecuencias dispersivas y construye la resonancia.

En el capítulo dos se aplican las diferencias centradas finitas ala ecuación de Schrödinger unidimensional para transformarla al caso discreto, luego se aplica la interpolación Whittaker-Kotelnilkov para suavizar el problema, se define el operador Halmiltoniano discreto el cual se encuentra el espectro esencial y por último construimos la resonancia para este caso.

En el capítulo tres se realiza una comparación de la función de onda que modela la resonancia de la ecuación de Schrödinger para un potencial regular en el caso discreto y continuo.

Capítulo 1

Resonancia Caso Continuo

En esta sección tenemos como objetivo construir una función de onda que modele la resonancia de una partícula asociada a la ecuación de Schrödinger para un potencial regular, para esto, partiremos de la ecuación de Schrödinger unidimensional continúa, definimos el operador Halmiltoniano asociado a la ecuación y todo lo referente con respecto a este operador, también conceptos importante para cumplir con el objetivo de este capítulo, tales como transformada Fourier, series de Neumann, método de Green, espectro de un operador y la definición matemática de la resonancia.

1.1. Ecuación Unidimensional de Schrödinger

La mecánica clásica tiene su cuna a mediados del siglo XVII de la mano de Isaac Newton, esta nueva teoría resulta importante en el desarrollo que tendrá la humanidad en las décadas posteriores. Pero para finales del siglo XIX, los científicos europeos se dan cuenta que dicha teoría no logra dar respuesta a los nuevos problemas que el hombre se estaba planteando. Lo que da surgimiento a la mecánica cuántica que fue descubierta paralelamente por Werner Heisenbergen en 1925 y por Erwin Schrödinger en 1926, el primero se basó en matrices, y el segundo en el sistema conocido como función de onda, poco después Schrödinger demostró que ambos métodos eran equivalentes, de forma que cualquier de ellos se puede deducir a partir del otro. Schrödinger postuló una formulación funcional del fenómeno cuántico, si $\varphi(x,t)$ es una función de onda asociado al fenómeno cuántico, ésta debe satisfacer la ecuación diferencial

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = (-\Delta + V(x))\psi(x,t).$$
(1.1)

La ecuación (1.1) se denomina ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, la cual modela la interacción de un electrón libre con una fuerza de potencial V.

El estado dinámico de un sistema cuántico se describe con el conocimiento de la función de onda ψ , la cual puede ser obtenida al solucionarse la ecuación de Schrödinger, es decir, conocer la función ψ nos permite establecer el valor de la densidad de probabilidad.

En la física cuántica, una consecuencia del principio de indeterminación, es que no todas las variables dinámicas de un sistema pueden ser determinadas exactamente en cada momento del tiempo. La descripción de un sistema dado solamente puede verse a través de diferentes mediciones que se complementan unas con otras, y en un instante t se puede determinar un conjunto de observables del sistema. El establecimiento de las reglas para obtener este conjunto de observables a partir de la función de onda constituye la esencia del método operacional.

Es importante para la mecánica cuántica los estados estacionarios, en los cuales las magnitudes físicas observables no varían en el transcurso del tiempo, la ecuación (1.1), puede ser transformada en una ecuación estacionaria, utilizando el método de separación de variable, esto es, consideremos que ψ se puede expresar de la siguiente forma

$$\psi(x,t) = u(t)\varphi(x),$$

sustituyendo en (1.1) obtenemos

$$\begin{split} \varphi(x) \cdot i \frac{\partial u}{\partial t} &= u(t)(-\bigtriangleup \varphi(x) + V(x)\varphi(x)) \\ \frac{i \frac{\partial u}{\partial t}}{u(t)} &= \frac{(-\bigtriangleup \varphi(x) + V(x)\varphi(x))}{\varphi(x)}, \end{split}$$

esta relación depende sólo de t en el miembro izquierdo y de x en el derecho por tanto, debe ser igual a una constante que denotaremos por E. Para u(t) se obtiene

$$iu'(t) + Eu(t) = 0,$$
 (1.2)

entonces la solución de la ecuación (1.2) es $u(t) = Ce^{iEt}$. Para φ la ecuación es

$$-\bigtriangleup \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x), \qquad (1.3)$$

es denominada la ecuación de Schrödinger estacionaria o independiente del tiempo, donde la constante E, constituye la energía del sistema. Esta ecuación es lineal y homogénea, por lo que se satisface el principio de superposición. Sin embargo, la superposición de dos estados estacionarios con diferentes energías no constituye un nuevo estado estacionario debido a las diferencias en la dependencia temporal de las funciones de onda. Determinar los valores reales de E para los se cumple la ecuación (1.3), es uno de los problemas importantes tanto para la física como para la matemática. La ecuación estacionaria de Schrödinger permite encontrar todos los estados estacionarios del sistema, no obstante, deben imponerse algunas condiciones complementarias en el infinito y en los puntos de singularidades del potencial V(x), acordes con el significado físico de la función de onda. Esto trae como resultado que en general no todos los posibles valores de la energía sean permitidos, similar a como ocurre con las frecuencias propias de una cuerda con sus extremos fijos. De esta forma, la ecuación (1.2) garantiza la cuantización de la energía y los valores que selecciona corresponden a las energías de los estados estacionarios. La cuantización de la energía surge como consecuencia de las condiciones complementarias que se le imponen a la función de onda y sus primeras derivadas espaciales que deben ser, funciones continuas, uní evaluadas y finitas en todos los puntos del espacio, incluso en aquellos puntos, líneas o superficie donde el potencial

V(x) es una función discontinua.

En esta sección simplificaremos la ecuación continua de Schrödinger en todo la recta real, la cual estará formulada así,

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \varepsilon V(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x), \qquad (1.4)$$

donde, E es la energía y V es un potencial de soporte compacto, es decir, $V \in C_0^{\infty}(\mathbb{R})$, $\varepsilon \to 0$ y representa una barrera de poca altura. Cuando $\int V(x)dx > 0$ estamos indicado que corresponde a una barrera, en caso contrario es un pozo. Si consideramos que V(x) = 0 para x en la recta real, la ecuación (1.4) toma la forma

$$-\varphi_{xx}(x) = E\varphi(x),$$

las soluciones para la ecuación anterior, son llamadas planas y son de la forma $\varphi(x) \sim e^{\pm Ex}$, cuando $|x| \to \infty$.

1.2. Operadores

Los espacios de Hilbert, se definen como un espacio con un producto interior que establece la norma del espacio, el cual es completo con respecto a esta norma, es decir, que, cualquier sucesión de Cauchy de elementos del espacio converge a un elemento en el espacio. Cada espacio de Hilbert es así también un espacio de Banach (pero no viceversa), nos sirven para clarificar y para generalizar el concepto de series de Fourier, ciertas transformaciones lineales tales como la transformación de Fourier, y son de crucial importancia en la formulación matemática de la mecánica cuántica. Aquí presentáremos algunos ejemplos de espacios de Hilbert que son importantes para este trabajo como son:

 Si B es un conjunto, definimos l²(B) como el espacio de las sucesiones sobre B, de la siguiente forma:

$$l^{2}(B) = \left\{ x : B \to \mathbb{C} : \sum_{b \in B} |x(b)|^{2} < \infty \right\},\$$

este espacio, se convierte en un espacio de Hilbert con el producto interior

$$\langle x, y \rangle = \sum_{b \in B} \overline{x(b)} y(b)$$
 para todo $x, y \in l^2(B)$.

Si el espacio $B = \mathbb{N}$, entonces el espacio lo denotamos por l^2 .

2. Espacios de Lebesgue son espacios funcionales asociados a espacios de medida (X, M, μ) , donde M es una σ -algebra de subconjuntos de X y μ es una medida contable aditiva en M. Si tomamos $X = \mathbb{R}^n$, denotaremos a $L^2_{\mu}(\mathbb{R}^n)$ como el espacio de funciones medibles cuadrado integrables, el producto interior en este espacio se define así, sean $f, g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{K}$ dos funciones con $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ o \mathbb{C} , entonces el producto interior

$$\langle f,g \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(x)} g(x) dx$$

también podemos definir la norma para cualquier $f \in L^2_{\mu}(\mathbb{R}^n)$ la cual esta dada de la siguiente forma:

$$||f||_2 = \left(\int_{\mathbb{R}^n} |f(x)| \cdot^2 dx\right)^{\frac{1}{2}} < \infty.$$

En los espacio de Hilbert, se pueden definir símbolos matemáticos cuyas acciones sobre una de las funciones del espacio nos conduce a una nueva función del mismo espacio, estos símbolos constituyen los operadores en el espacio dado. Para definir los operadores consideremos X, Y dos espacios normados, denotaremos ambos espacios con la misma norma, salvo que este lleve alguna confusión. Comenzáremos con un resultado que motive la definición siguiente

Teorema 1.2.1. Sea $T: X \to Y$ una aplicación lineal, las siguientes afirmaciones son equivalentes

- **1.** T es continuo en x = 0.
- **2.** T es uniformemente continuo en X.
- **3.** Existe una constante $C \ge 0$ tal que $||Tx|| \le C ||x||$ para todo $x \in X$.

Observación 1.2.2. La demostración de este teorema, la podemos ver en [5].

Definición 1.2.3. Una aplicación lineal y continua entre dos espacios normados $T: X \to Y$ se denomina operador de X en Y. El conjunto de todo los operadores de X en Y lo denotamos como L(X,Y) y de igual forma al conjunto de operadores de X en X como L(X) = L(X,X). Este espacio lo dotamos con la siguiente norma

 $||T|| = \inf\{C > 0 : ||Tx|| \le C ||x|| \text{ para todo } x \in X\} = \sup\{||Tx|| : ||x|| \le 1\}.$

Ejemplo 1.2.4. Sea $X = L^p(\Omega), 1 . Dado <math>f \in L_q(\Omega)$ para $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, definimos el operador multiplicación por

$$M_f: L^p(\Omega) \to L^1(\Omega)$$

dado por $M_f(g) = fg$, podemos observar que el operador $M_f \in L(L^p(\Omega), L^1(\Omega))$ y que $\|M_f\| = \|f\|_q$

Proposicion 1.2.5. Sean X, Y espacios de Hilbert sobre un campo \mathbb{K} , sea $T \in L(X,Y)$. Existe un único operador $T^* \in L(Y,X)$, tal que

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle$$
 para todo $x \in X, y \in Y$.

Ademas, $||T^*|| \le ||T||$.

Definición 1.2.6. Dados X, Y dos espacios de Hilbert sobre el campo K. Para cada $T \in L(X,Y)$ se define el operador adjunto de T al único $T^* \in L(Y,X)$ tal que

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle$$
 para todo $x \in X, y \in Y$.

Definición 1.2.7. Se dice que un operador lineal acotado $T : H \to H$, es autoadjunto (o Hermítiano) si $T^* = T$.

Mencionáremos algunas propiedades de los operadores autoadjuntos.

- 1. Cualquier valor propio de un operador autoadjunto es real.
- **2.** Los vectores propios de T, forman una base ortogonal para el espacio de Hilbert.

Definición 1.2.8. Sea $\hat{H} : L^2(\Omega) \to L^2(\Omega)$, un operador autoadjunto, es llamado operador Hamilton, si tiene la siguiente forma:

$$\hat{H}(\varphi) = (-\bigtriangleup + V)\varphi$$

El Hamiltoniano cuántico \hat{H} es el observable que representa la energía total del sistema, formalmente se define como un operador autoadjunto definido sobre un dominio denso en el espacio de Hilbert del sistema. Dependiendo del sistema físico, el operador Hamiltoniano puede no estar definido sobre todo el espacio. Si no existe el límite para el valor máximo de la energía de un sistema entonces el operador Hamiltoniano será un operador no acotado y en general no estará definido en todo el espacio de Hilbert de todo el sistema sino sólo en un dominio denso de él.

1.2.1. Series de Neumann

La convergencia de series infinitas de operadores $\sum T_n$ puede ser definida como se realiza con las series infinitas de vectores, y preservan algunos conceptos, tales como una serie absolutamente convergente siempre y cuando la serie $\sum ||T_n||$ sea convergente para alguna norma.

Definición 1.2.9. Sea T un operador, una serie de Neumann para T, es una serie de la forma

$$\sum_{n=0}^{\infty} T^n,$$

donde, T^n simboliza la aplicación del operador T n- veces, para que la serie de Neumann $\sum T^n$ sea convergente, debemos garantizar que si $\|\sum T^n\| \leq \sum \|T^n\| y \sum \|T^n\|$ es convergente, entonces $\sum T^n$ es convergente.

Ahora, si consideramos que el operador T es acotado y la serie de Neumann de T es convergente, entonces el operador 1 - T es invertible y su inversa es la serie:

$$(1-T)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} T^n.$$

1.2.2. Transformada de Fourier

La transformada de Fourier es ampliamente utilizada en la matemática pura y aplicada como en algunos campos de la ingeniería, además es una herramienta para resolver ecuaciones en derivadas parciales. La idea básica de la transformada de Fourier en lo referente a las ecuaciones diferenciales parciales es la misma que en el caso de la Laplace, esto es, transformar un problema complicado en otro más fácil de resolver y luego obtener la solución del problema original como la transformada de Fourier inversa de la solución del problema transformado. La transformada de Fourier puede ser vista desde operadores.

Definición 1.2.10. Definimos el operador transformada de Fourier como una aplicación $F : L^1(\mathbb{R}) \to L^1(\mathbb{R})$ tal que para todo $f \in L^1(\mathbb{R})$ se tiene que

$$\tilde{f}(p) = F(f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(x)e^{-ipx}dx, \qquad (1.5)$$

en realidad, la integral que aparece en (1.5) no se entiende en el sentido de Riemann impropio sino en el sentido de Lebesgue. Lo mismo sucede en la definición del espacio $L^1(\mathbb{R})$. Sin embargo, si f es continua a trozos y si existen los siguientes límites y son finitos

$$\lim_{a \to -\infty} \int_{a}^{0} |f(x)| \, dx \qquad \mathbf{y} \qquad \lim_{b \to \infty} \int_{0}^{b} |f(x)| \, dx,$$

es decir, si |f| es integrable en el sentido de Riemann impropio, entonces $f \in L^1(\mathbb{R})$ y por tanto existe la transformada de Fourier de f la cual viene dada por (1.5). En este capítulo entenderemos que las funciones que consideramos son absolutamente integrables en sentido de Riemann impropio. Tomemos un ejemplo donde se aplica la transformada de Fourier

Ejemplo 1.2.11. Consideremos la función característica en el intervalo [a, b], la cual está definida de la siguiente manera

$$\chi_{[a,b]}(x) = \begin{cases} 1 & si \ x \in [a,b] \\ 0 & si \ x \notin [a,b] \end{cases}$$

aplicando la transformada de Fourier a la función característica se tiene que

$$\left[\tilde{\chi}_{[a,b]}\right](p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-ipb} - e^{-ipd}}{-ip}$$

siempre que, $p \neq 0$ y cuando p = 0 se tiene que $\left[\tilde{\chi}_{[a,b]}\right](0) = \frac{b-a}{\sqrt{2\pi}}$. Un caso particular es cuando tomamos a = -b, con b > 0 entonces

$$\tilde{\chi}_{[a,b]}(x) = \begin{cases} \frac{senpb}{p\sqrt{2\pi}} & si \ p \neq 0\\ \frac{b}{\sqrt{2\pi}} & si \ p = 0 \end{cases}$$

Enunciamos a continuacion algunas propiedades básicas de la transformada de Fourier.

Proposicion 1.2.12. Sean $f, g \in L^1(\mathbb{R})$ $y \alpha, \beta \in \mathbb{C}$, entonces

- a. $[\alpha f + \beta g] = a\tilde{f} + \beta \tilde{g}.$
- b. Sean $a, b \in \mathbb{R}$, con $a \neq 0$, entonces la función g(x) = f(ax+b) pertenece a $L^1(\mathbb{R})$, además,

$$\tilde{g}(p) = \frac{1}{|a|} e^{\frac{ipb}{a}} \tilde{f}\left(\frac{p}{a}\right).$$

c. $e^{iax} f(x) \in L^1(\mathbb{R}) \ y \ [e^{iax} f(x)] \ (p) = \tilde{f}(p-a).$

d. Si $f, f', \dots, f^n \in L^1(\mathbb{R})$, entonces

$$[f^n](p) = (ip)^n \tilde{f}(p),$$

donde, f^n representa la n-esima derivada de f.

e. Si $x^n f(x) \in L^1(\mathbb{R})$, con n > 0, entonces

$$[x^n f(x)](p) = (i)^n \frac{\partial^n}{\partial p^n} \tilde{f}(p).$$

Nos ocuparemos ahora del problema de recuperar la función f a partir de su transformada de Fourier \tilde{f} . Para ello, dada $f \in L^1(\mathbb{R})$ se define su transformada inversa de Fourier como

$$f^{-1}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} f(p) dp.$$

Un primer resultado de inversión es el siguiente Teorema de Inversión de Fourier.

Teorema 1.2.13. Sea $f \in L^1(\mathbb{R})$ y supongamos que $\tilde{f} \in L^1(\mathbb{R})$. Entonces $f = (\tilde{f})^{-1}$, es decir

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} \tilde{f}(p) dp$$
, para todo $x \in \mathbb{R}$.

Hasta ahora hemos desarrollado parte de la teoría de la transformada de Fourier en el marco del espacio $L^1(\mathbb{R})$. Sin embargo, sugiere que el espacio $L^2(\mathbb{R})$ también ha de jugar algún papel importante en toda esta teoría de la transformada de Fourier. Esto es efectivamente cierto. Como veremos enseguida, es $L^2(\mathbb{R})$ y no $L^1(\mathbb{R})$ el espacio en el que la transformada de Fourier tiene un mejor comportamiento. Veamos, en primer lugar, que la identidad de Parseval de las series de Fourier tiene también su análogo para la transformada de Fourier, esto se resumen en el siguiente teorema

Teorema 1.2.14. La transformada de Fourier, definida en principio sobre $L^1 \cap L^2$, se extiende de manera única a una aplicación de L^2 en L^2 . Ademas se cumple que

$$\left\| \tilde{f} \right\|_{2}^{2} = \frac{1}{2\pi} \left\| f \right\|_{2}^{2}.$$

1.2.3. Valores Propios

El espectro de un operador es un conjunto de valores complejos que generaliza el concepto de valor propio (autovalor) a espacios vectoriales de dimensión infinita, y es muy importante tanto en análisis funcional como en la mecánica cuántica. Los posibles valores de la energía de un sistema físico vienen dados por los valores propios del operador Hamiltoniano el cual tiene dos significados distintos, aunque relacionados. En la mecánica clásica, es una función que describe el estado de un sistema mecánico en términos de variables posición y momento, y es la base para la reformulación de la mecánica clásica conocida como mecánica Hamiltoniana. En la mecánica cuántica, el operador Hamiltoniano es el correspondiente observable de la energía del sistema. Dependiendo del sistema físico, el espectro de energías puede ser discreto o continuo. Se da el caso de que algunos sistemas presentan un espectro continuo en un intervalo de energías, y discreto en otro. Un ejemplo es el pozo finito de energía potencial, que admite estados ligados con energías discretas, negativas, estados libres con energías continuas y positivas.

Definición 1.2.15. Sea $T : D(T) \subset X \to X$ un operador lineal. el conjunto resolvente T, es el conjunto $\rho(T)$ de todos los $\lambda \in C$, tales que $\lambda - T$ tiene un rango denso en X y tiene inverso continuo. Para $\lambda \in \rho(T)$, operador $(\lambda - T)^{-1}$ que denotamos por $R(\lambda;T)$, lo llamaremos operador resolvente. El espectro de T es el conjunto $\sigma(T)$ de los elementos que no se encuentran en $\rho(T)$, es decir, valores donde el operador resolvente puede estar no definido, ser no acotado o no tener un dominio denso.

Definición 1.2.16. Un valor propio λ de un operador T se dice aislado si existe $\delta > 0$ tales que $\sigma(T) \cap (\lambda - \delta, \lambda + \delta) = \{\lambda\}.$

Definición 1.2.17. Se denomina espectro discreto $\sigma_{disc}(T)$ de un operador T al conjuntos de los valores aislados de T de multiplicidad finita.

Definición 1.2.18. Se denomina espectro esencial $\sigma_{ess}(T)$ de un operador T al conjunto $\sigma_{ess}(T) = \sigma(T) - \sigma_{disc}(T)$. **Definición 1.2.19.** Sea $(u_v) \in D(T), v \to 0$ una sucesión de Weyl del operador T y λ si:

- **1.** $||u_v|| = 1$ para todo v.
- **2.** $||(T \lambda)u_v|| \to 0$ cuando $v \to 0$.
- **3.** $u_v \to 0$ cuando $v \to 0$.

Teorema 1.2.20. Sea T un operador autoadjunto. Entonces

 $\sigma_{ess}(T) = \{\lambda / \text{ existe una successon } \{u_v\} \in D(T) \text{ para } T \ y \ \lambda\}$

Teorema 1.2.21. Si T_1, T_2 son operadores autoadjuntos donde T_2 es compacto entonces $\sigma_{ess}(T_1 + T_2) = \sigma_{ess}(T_1)$

Observación 1.2.22. La demostración de los teorema 1.2.20 y 1.2.21 la podemos ver [23].

Lema 1.2.23. El espectro esencial del operador Halmitoniano \hat{H} es el intervalo $[0, +\infty)$

Demostración. Sea $\lambda \in (\mathbb{C} - [0, +\infty))$, consideremos $u \in L^2(\mathbb{R})$ una función tal que $(\lambda I - \hat{H}(u)) = (\lambda I + D^2)(u) = 0$. Aplicando la transformada de Fourier obtenemos $(\lambda I + D^2)\tilde{u} = (\lambda - p^2)\tilde{u} = 0$, como $(\lambda - p^2)$ no se anula esto implica que u = 0, por lo tanto $\lambda I - D^2$ es uno a uno.

Ahora para cada $v \in L^2(\mathbb{R})$ existe un $u \in L^2(\mathbb{R})$ tal que $(\lambda I + D^2)(u) = v$, aplicando el teorema de inversión para la transformada de Fourier obtenemos

$$u = (\lambda I + D^2)^{-1}v = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}\tilde{v}(p)}{\lambda - p^2} dp.$$

Veamos que el operador $(\lambda I + D^2)^{-1}$ es acotado

$$\begin{aligned} \left\| (\lambda + D^2)^{-1} v \right\|^2 &= \left\| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx} \tilde{v}(p)}{\lambda - p^2} dp \right\|^2 \\ &\leq \frac{1}{m^2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{v}(p)|^2 dp = \frac{1}{m^2} \|v\|^2 \end{aligned}$$

donde, m es la minima distancia entre λ y los puntos del conjunto $[0, +\infty)$, por tanto $(\lambda I + D^2)^{-1}$ es acotado, de esta forma cualquier $\lambda \in (\mathbb{C} - [0, +\infty))$ esta en la resolvente de $\rho(D^2)$.

Ahora tomemos un $\lambda \in [0, +\infty)$ y consideremos la sucesiones de funciones $u_v = \frac{v^{\frac{1}{4}}}{r_v}e^{-vx^2+ip_ox}$ donde v > 0 y $r_v = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$, veamos que sucesiones de funciones u_v son sucesiones de Weyl. En efecto, primero veamos que u_v es de norma 1, para todo v, esto es,

$$||u_{v}||^{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{v^{\frac{1}{4}}}{r_{v}} e^{-vx^{2} + ip_{0}x} \right|^{2} dx$$

$$= \frac{v^{\frac{1}{2}}}{r_{v}^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2vx^{2}} |e^{ip_{0}x}|^{2} dx$$

$$= \frac{v^{\frac{1}{2}}}{r_{v}^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2vx^{2}} dx, \qquad (1.6)$$

tomando $\tau^2 = 2vx^2$ y $\frac{d\tau}{\sqrt{2v}} = dx$ remplazando en (1.6) obtenemos que

$$||u_v||^2 = \frac{v^{\frac{1}{2}}}{r_v^2 \sqrt{2v}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^2} d\tau = 1,$$

esto indica que $||u_v|| = 1$ para todo v. Ahora calculamos la transfomada de Fourier de tales funciones

$$\begin{aligned} \widetilde{u}_{v} &= \frac{v^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} e^{-vx^{2}} e^{ip_{0}x} dx \\ &= \frac{v^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-v(x^{2}+i(p-p_{0})\frac{x}{v})} dx \\ &= \frac{v^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-v \left[\left(x+i\frac{(p-p_{0})}{2v} \right)^{2} + \frac{(p-p_{0})^{2}}{4v^{2}} \right] dx} \\ &= \frac{v^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi}\sqrt{v}} e^{\frac{-(p-p_{0})^{2}}{4v}} \int_{\mathbb{R}+i\frac{(p-p_{0})}{2\sqrt{v}}} e^{-\xi^{2}} d\xi \\ &= \frac{v^{\frac{-1}{4}}}{r_{v}\sqrt{2}} e^{\frac{-(p-p_{0})^{2}}{4v}}, \end{aligned}$$
(1.7)

donde, $\xi = x + i \frac{p - p_0}{2v}$ y $\frac{d\xi}{dx} = 1$. Calculando el cuadrado de la norma de $(\lambda + D_h^2)u_v$

$$\begin{split} \left| (\lambda + D^2) u_v \right|_{L_2}^2 &= \left\| (\lambda - p^2) \widetilde{u}_v \right\|_{L_2}^2 \\ &= \left\| (p_0^2 - p^2) \widetilde{u}_v \right\|_{L_2}^2 \\ &= \frac{1}{2\sqrt{v}} \int_{-\infty}^{\infty} (p_0^2 - p^2)^2 e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2v}} dp \end{split}$$

donde, $\lambda = p_0^2$, ya que $\lambda \in [0, \infty)$. Acotando la integral anterior separadamente en los intervalos $(-\infty, p_0 - 1], [p_0 - 1, p_0 + 1]$ y $[p_0 + 1, \infty)$. Observemos primero que

$$\begin{split} \int_{p_0+1}^{\infty} (p_0^2 - p^2) e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2v}} dp &\leq \int_{p_0+1}^{\infty} e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2v}} dp \\ &= \int_{1}^{\infty} e^{\frac{-(p')^2}{2v}} dp' \\ &\leq \int_{1}^{\infty} e^{\frac{-p'}{2v}} dp' = -2\beta e^{\frac{-p'}{2v}} \Big|_{1}^{\infty} \\ &= -2v \Big[\lim_{p' \to \infty} e^{\frac{-p'}{2v}} - e^{\frac{-1}{2v}} \Big] \\ &= 2v e^{\frac{-1}{2v}}. \end{split}$$
(1.8)

La desigualdad (1.8) se obtiene de la observación 1.2.24, $p' = p - p_0$, $\frac{dp'}{dp} = 1$, $u = \frac{-p'}{2v}$, $\frac{du}{dp} = \frac{-1}{2v}$. Así, tenemos que

$$\frac{1}{2\sqrt{\beta}} \int_{p_0+1}^{\infty} (p_0^2 - p^2) e^{\frac{-(p-p_0)}{2v}} dp \le \frac{1}{2\sqrt{v}} \cdot 2v \ e^{\frac{-1}{2v}} = \sqrt{v} \ e^{\frac{-1}{2v}} \to 0,$$

cuando $v \to 0$. Analogamente, en $(-\infty, p_0 - 1]$ la integral tiende a cero, cuando $\beta \to 0$.

Por el lema de Hadamard, (ver, [14], Secc. 2.2 y [15], Secc. 20) se tiene

$$p^{2} - p_{0}^{2} = (p - p_{0}) \int_{0}^{1} (\xi^{2})'_{\xi} |_{\xi = p_{0} + s(p - p_{0})} ds,$$

Ahora, consideramos la integral en $[p_0 - 1, p_0 + 1]$,

$$\int_{p_0-1}^{p_0+1} (p_0^2 - p^2)^2 e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2v}} dp = \int_{p_0-1}^{p_0+1} (p - p_0)^2 F(p, p_0) e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2v}} dp$$

$$\leq M \int_{p_0-1}^{p_0+1} (p - p_0)^2 e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2v}} dp \qquad (1.9)$$

$$= M\sqrt{2v} \int_{-\frac{1}{\sqrt{2\beta}}}^{\sqrt{2\nu}} 2vt^2 \ e^{-t^2} dt$$
$$= M \ 2\sqrt{2} \ v^{\frac{3}{2}} \int_{-\frac{1}{\sqrt{2\nu}}}^{\frac{1}{\sqrt{2\nu}}} t^2 \ e^{-t^2} dt$$
(1.10)

$$= 2\sqrt{2} \ M \ v^{\frac{3}{2}} \left[\frac{-1}{2} \left(t \ e^{-t^2} \Big|_{-\frac{1}{\sqrt{2\beta}}}^{\frac{1}{\sqrt{2\beta}}} - \int_{-\frac{1}{\sqrt{2\beta}}}^{\frac{1}{\sqrt{2\beta}}} e^{-t^2} dt \right) \right]$$
(1.11)

$$= \sqrt{2} \ M \ v^{\frac{3}{2}} \left(\int_{-\frac{1}{\sqrt{2v}}}^{\frac{1}{\sqrt{2v}}} e^{-t^2} dt - \sqrt{\frac{2}{v}} \ e^{\frac{-1}{2v}} \right) \to 0,$$

cuando $v \to 0$, con $t = \frac{p-p_0}{\sqrt{2v}}$, $\frac{dt}{dp} = \frac{1}{\sqrt{2v}}$. Por la observación 1.2.25 tenemos la desigualdad (1.9), además aplicando integración por partes a (1.10) tomando u = t y $dv = te^{-t^2}dt$ obtenemos (1.11). Luego

$$\frac{1}{2\sqrt{v}} \int_{p_0-1}^{p_0+1} (p_0^2 - p^2)^2 e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2v}} dp \le \frac{1}{2\sqrt{v}} \sqrt{2} \ M \ v^{\frac{3}{2}} \Big(\int_{-\frac{1}{\sqrt{2v}}}^{\frac{1}{\sqrt{2v}}} e^{-t^2} dt - \sqrt{\frac{2}{v}} \ e^{\frac{-1}{2v}} \Big) \to 0,$$
cuando $v \to 0.$

Así, tenemos que $||u_v||$ es constante no nula y que $||(\lambda + D^2)u_v|| \to 0$, cuando $v \to 0$ si $\lambda \in [0, \infty)$. Es decir, hemos comprobado que efectivamente las funciones u_v son funciones propias aproximadas para $\lambda \in [0, \infty)$, lo cual concluye la prueba.

Observación 1.2.24. Debido a que $p_0^2 \leq p^2$, tenemos que

$$(p_0^2 - p^2)e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2v}} \le e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2v}},$$

Observación 1.2.25. Dado que $F(p, p_0) = p + p_0$ tomando $p \in [p_0 - 1, p_0 + 1]$ tenemos

$$2p_0 - 1 \le p + p_0 \le 2p_0 + 1 = M,$$

así, M es máximo de función F en el intervalo $[p_0 - 1, p_0 + 1]$.

1.2.4. Función Delta de Dirac

La "función" delta de Dirac puede definirse en términos de la función

$$d_a(x) = \begin{cases} \frac{1}{2a} & \text{si } |x| \le a \\ 0 & \text{si } |x| > a \end{cases}$$

Notese que para cada a > 0 se tiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} d_a(x) = \int_{-a}^{a} \frac{1}{2a} dx = 1,$$

Si se toma el límite de $d_a(x)$ cuando $a \to 0$ y se define ésta como la delta de Dirac, es decir,

$$\delta(x) = \lim_{a \to 0} d_a(x),$$

entonces puede decirse de manera informal que

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty \text{ si } x = 0\\ 0 \text{ si } x \neq 0 \end{cases}$$

y además que se tiene la propiedad

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

De manera más general, si se aplica una traslación $x \to x - x_0$, se tiene

$$d_a(x - x_0) = \begin{cases} \frac{1}{2a} \text{ si } |x - x_0| \le a \\ 0 \text{ si } |x - x_0| > a \end{cases}$$

es decir que

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty & \text{si } x = x_0 \\ 0 & \text{si } x \neq x_0 \end{cases}$$

y que claramente preserva la propiedad

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1,$$

un resultado importante, que generaliza el anterior es

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0).$$

Siempre que f sea una función continua en x_0 y acotada en todo \mathbb{R} . Se encuentra que hay una infinidad de representaciones para esta función. En particular, cualquier densidad de probabilidad unimodal en el límite en que la varianza tiende a cero dará una representación legítima. Por ejemplo

i. Pueden darse otras formas en términos de funciones como la exponencial:

$$\delta(x - x_0) = \lim_{a \to 0} \frac{1}{2a} e^{\frac{|x - x_0|}{a}}$$

•

ii. Apartir de la transformada de Fourier puede encontrarse la representación integral

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x - x_0)} dk$$

Otras representaciones, pueden darse en térrminos de series de Fourier

iii. Serie de Senos:

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \frac{l}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{sen}(\frac{n\pi}{l} x_0) \operatorname{sen}(\frac{n\pi}{l} x) & \text{si } 0 \le x \le l \\ 0 & \text{si } x < 0 \text{ y } x > l \end{cases}$$

iv. Serie de Cosenos:

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \frac{1}{l} + \frac{l}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\frac{n\pi}{l} x_0) \cos(\frac{n\pi}{l} x) & \text{si } 0 \le x \le l \\ 0 & \text{si } x < 0 \text{ y } x > l \end{cases}$$

v. Serie de Exponenciales Complejas:

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \frac{1}{2l} \sum_{n = -\infty}^{\infty} e^{i\frac{n\pi}{l}(x - x_0)} & \text{si } 0 \le x \le l \\ 0 & \text{si } x < 0 \text{ y } x > l \end{cases}$$

1.3. Función de Green para la ecuación Schrödinger

La ecuación (1.4) la escribimos de la siguiente manera.

$$-\varphi''(x) + \beta^2 \varphi(x) = -\varepsilon V(x)\varphi(x),$$

el operador lineal diferencial de la ecuacion anterior, esta dada por

$$L = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \beta^2,$$

la función de Green asociada $G(x, \zeta)$ satisface

$$-G'' + \beta^2 G = \delta(x - \zeta).$$

Utilizando la transformada de Fourier y las propiedades adecuadas de al función Delta de Dirac, se obtiene que

$$-(ip)^2\tilde{G} + \beta^2\tilde{G} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ip\zeta},$$

esto es,

$$\tilde{G} = \left(\frac{1}{p^2 + \beta^2}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ip\zeta}\right).$$
(1.12)

Aplicando la tranformada inversa de Fourier a (1.12) se tiene que

$$G(x,\zeta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ip\zeta} \tilde{G}(p,\zeta) dp$$

por otro lado ecuación (1.12) observamos que $G(x,\zeta) = (s*q)(x)$, donde

$$s(x) = F^{-1}\left(\frac{1}{p^2 + \beta^2}\right) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}e^{-\beta|x|}, \qquad (1.13)$$

$$q(x) = F^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ip\zeta}\right) = \delta(x-\zeta).$$
(1.14)

De las expresiones (1.13) y (1.14) se obtiene la funcion de Green, esta dada por

$$G(x,\zeta) = (s*q)(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int s(x-t)q(t)dt$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-b|x-t|} \delta(t-\zeta)dt$$
$$\frac{1}{2\beta} e^{-\beta|x-\zeta|}.$$

Apartir de lo anterior, se quiere construir soluciones de la ecuación (1.3) que tenga la forma

$$\varphi(x) = -\varepsilon(G * V\varphi)(x). \tag{1.15}$$

1.4. Resonancia

El fenómeno de resonancia, en la mecánica cuántica, ha sido intensamente estudiado desde el punto de vista de sus efectos físicos y desde la formulación matemática (ver [4], [14] y [18]). La resonancia hace alusión a un fenómeno de la física de partículas cuánticas que permanecen un largo período de tiempo en una región del espacio. Esta idea se refleja en concentración de la amplitud de probabilidad, en una región acotada del espacio, o decaimiento exponencial de la medida de probabilidad en la variable temporal.

En la mecánica clásica la dinámica está dada por la ecuación de Newton. Cuando una partícula clásica se ve enfrentada a una fuerza potencial, su trayectoria dependen directamente de la posición y el momentum en un instante dado. Pero la trayectoria de la partícula puede ser o no acotada. A diferencia del caso clásico, una partícula cuántica con energía mayor que el ínfimo del potencial, siempre se escapa al infinito. Este fenómeno es conocido como el efecto túnel.

En la física matemática, innumerables autores han tratado de presentar una definición formal para el fenómeno de resonancia, siendo éste el principal problema, inclusive ciertas definiciones resultan contradictorias o no representan el fenómeno físico. Actualmente son tres las definiciones más utilizadas por los investigadores: (i) Polos de la Resolvente, (ii) Decaimiento Exponencial y, (iii) Tripleta de Gelfand.

Nosotros abordaremos el fenómeno de resonancia vía el concepto de frecuencias dispersivas (o también conocidas como frecuencias de Scattering), que hace relación con soluciones a la ecuación de Schrödinger cuyo comportamiento asintótico es de crecimiento exponencial. Este comportamiento define a las que se conocen como soluciones salientes, o soluciones outgoing. Esta alternativa está basada en el trabajo realizado por Loe (ver [8]), en el caso clásico para la ecuación de onda, donde asocian resonancia a frecuencias de scattering (ver[5]).

Definición 1.4.1. Una solución φ de la ecuación (1.4) es llamada resonancia si φ satisface

$$\varphi(x) \propto e^{\beta|x|} \qquad |x| \to \infty$$
 (1.16)

 $con \ \beta > 0 \ y \ E = -\beta^2.$

Teorema 1.4.2. Sea $\int_{-\infty}^{\infty} V(x) dx > 0$. Entonces para ϵ suficientemente pequeño, la ecuación (1.4) tiene un resonancia para $E = -\beta^2$, donde

$$\beta = \frac{\varepsilon}{2}\tilde{V}(0) + O(\varepsilon^2) \tag{1.17}$$

Demostración. Primero construiremos una solución del ecuación (1.4) que tenga la forma

$$\varphi(x) = [G * (-\epsilon V \varphi)](x),$$

aplicando la transformada de Fourier

$$\widetilde{\varphi}(p) = \frac{-\epsilon}{p^2 + \beta^2} \widetilde{V\varphi}(p), \qquad (1.18)$$

donde $\widetilde{G}(p) = \frac{1}{p^2 + \beta^2}$

$$(p^2 + \beta^2)\widetilde{\varphi}(p) = A(p). \tag{1.19}$$

Debido a que V(x), es de soporte compacto cuando |x| > r, la solución en este caso tiene la forma $\varphi(x) = A_1 e^{-\beta x} + A_2 e^{\beta x}$.

Para la ecuación (1.19) se tiene que la resonancia buscada en todo el real tiene la forma

$$\varphi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} \frac{A(p)}{p^2 + \beta^2} dp + A_1 e^{-\beta x} + A_2 e^{\beta x}, \qquad (1.20)$$

para $|x| \to \infty$. Miremos el comportamiento de (1.20), definimos los siguientes contornos de los polos simples

$$D_{+} = (-\infty, 1] \cup \{p + iq : p^{2} + q^{2} = 1, q > 0\} \cup [1, \infty)$$
$$D_{-} = (-\infty, 1] \cup \{p + iq : p^{2} + q^{2} = 1, q < 0\} \cup [1, \infty).$$

Aplicando el teorema del residuo de Cauchy (1.20), se tiene que para x > 0

$$\varphi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{D_+} e^{ipx} \frac{A(p)}{p^2 + \beta^2} dp + \left(\frac{A(i\beta)}{2\beta} + A_1\right) e^{-\beta x} + A_2 e^{\beta x}.$$
 (1.21)

Consideramos el lado derecho de la (1.21) y $A_1 = -\frac{A(i\beta)}{2\beta}$, obtenemos

$$\varphi(x) = A_2 e^{\beta x} + \frac{1}{2\pi} e^{-x} \int \frac{e^{ip} A(p+i)}{(p+i)^2 + \beta^2} dp$$

Asi, $\varphi(x) = A_2 e^{\beta x} + O(e^{-x})$, cuando $x \to \infty$.

Analogamente, $\varphi(x) = A_1 e^{-\beta x} + O(e^x)$, cuando $x \to -\infty$ y $A_2 = -\frac{A(-i\beta)}{2\beta}$.

Por tanto,

$$\varphi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} \frac{A(p)}{p^2 + \beta^2} dp - \frac{A(i\beta)}{2\beta} e^{-\beta x} - \frac{A(-i\beta)}{2\beta} e^{\beta x}.$$
 (1.22)

La transformada de Fourier de (1.22) tiene la forma

$$\widetilde{\varphi}(p) = \frac{A(p)}{p^2 + \beta^2} + 2\pi A_1 \delta(p - i\beta) + 2\pi A_2 \delta(p + i\beta).$$
(1.23)

Sustituyendo la ecuación (1.23) en (1.18), se obtiene

$$A(p) = -\frac{\epsilon}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{V}(p-\xi) \frac{A(\xi)}{\xi^2 + \beta^2} d\xi - \epsilon A_1 \widetilde{V}(p-i\beta) - \epsilon A_2 \widetilde{V}(p+i\beta).$$
(1.24)

Aplicando el teorema del residuo de Cauchy a la ecuación (1.24), se obtiene

$$A(p) = -\frac{\epsilon}{2\pi} \int_{D_+} \widetilde{V}(p-\xi) \frac{A(\xi)}{\xi^2 + \beta^2} d\xi + \epsilon \left(\frac{A(-i\beta)}{2\beta}\right) \widetilde{V}(p+i\beta).$$
(1.25)

Definimos Ω el conjunto de funciónes acotada en $B_1 = \{z \in C : |I_z| < 1\}$, con la norma $\|\varphi\| = \sup_{z \in B_1} |\varphi(z)|$, y el operador $T_\beta : \Omega \to \Omega$ por

$$[T_{\beta}A(\xi)](p) = \int_{D_{+}} \widetilde{V}(p-\xi) \frac{A(\xi)}{\xi^{2}+\beta^{2}} d\xi, \quad p \in \Omega.$$
(1.26)

Podemos reescribir la ecuación (1.25)

$$[(I + \epsilon T_{\beta})A(\xi)](p) = \epsilon \left(\frac{A(-i\beta)}{2\beta}\right) \widetilde{V}(p + i\beta).$$
(1.27)

Puesto el operador T_{β} es acotado, por tanto ϵT_{β} es pequeño, corresponde a un operador contracción y se puede hallar el inverso, asi:

$$A(p) = \epsilon \left(\frac{A(-i\beta)}{2\beta}\right) \left[(I + \epsilon T_{\beta})_{\xi \to p} \right]^{-1} \widetilde{V}(\xi + i\beta).$$
(1.28)

Ahora, evaluando la ecuación (1.28) en $p = -i\beta$, obtenemos

$$1 = \frac{1}{2\beta} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \epsilon^{n+1} [T^n_{\beta} \widetilde{V}(\xi + i\beta)](-i\beta).$$
(1.29)

Tomando los primeros términos de (1.29) tenemos

$$1 = \frac{\epsilon}{2\beta} \widetilde{V}(\xi + i\beta)|_{\xi = -i\beta} + O(\epsilon^2).$$

Finalmente multiplicando por $\beta,$ obtenemos (2.8), esto es

$$\beta = \frac{\epsilon}{2}\widetilde{V}(0) + O(\epsilon^2).$$

Esto concluye con la demostración.

Capítulo 2

Resonancia Discreta

Las ecuaciones en diferencias finitas centradas surgen frecuentemente en análisis numérico, cuando se busca aproximar sistemas continuos por discretos y en modelo de aplicación que incluyen a la mecánica cuántica, en este capítulo presentaremos la función de onda que modela la resonancia asociada a la ecuación discreta de Schrödinger para un potencial regular. Para eso, primero aplicamos diferencias finitas centradas a la ecuación (1.4), luego se busca una interpolación para suavizar el problema, definimos el operador Hamiltoniano para el caso discretó al cual estudiamos su espectro y por último construimos la función de onda que modele la resonancia para esta ecuación.

2.1. Ecuación Discreta de Schrödinger

Sea $\Omega = \{\bar{x} + jh : j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ una red uniforme con el paso h > 0, en la recta real y $\varphi(x)$ una función con derivada finita y continua. Consideremos $\varphi(jh) = \varphi_j$ y la primera derivada de $\varphi(x)$, entonces tenemos

$$\varphi'(x) \sim \frac{\varphi_{j+1} - \varphi_{j-1}}{2h} \tag{2.1}$$

de igual forma podemos aproximar la segunda derivada de la función $\varphi(x)$, obtenemos que

$$\varphi''(x) \sim \frac{\varphi_{j+1} - 2\varphi_j + \varphi_{j-1}}{h^2}, \qquad (2.2)$$

estas dos ecuaciones (2.1) y (2.2) son llamadas aproximaciones por diferencias finitas centradas (ver [20] sec 3.5.4). La ecuación (1.4) se transforma en una nueva ecuación al sustituir las derivadas correspondientes, se obtiene

$$-\frac{1}{h^2}\left(\varphi_{j+1} - 2\varphi_j + \varphi_{j-1}\right) + \varepsilon V_j \varphi_j = E\varphi_j, \qquad (2.3)$$

donde, $\ j\in\mathbb{Z}$, $\varepsilon\to 0^+$ y V_j es un potencial discreto de soporte compacto, es decir,

$$V_j = 0, \quad |j| \ge R, \quad R \in \mathbb{R}^+.$$

$$(2.4)$$

2.2. Interpolación en el Caso Discreto

La teoría de operadores en espacios de Hilbert tiene multiples aplicaciones en física y especialmente en la mecánica cuántica, en esta sección se establecen las propiedades más importantes de los operadores

Definición 2.2.1. Sea el operador $E_y : L_2(\mathbb{R}) \to L_2(\mathbb{R})$ es llamado el operador traslación para $y \in \mathbb{R}$, se define por

$$[E_y u](x) = u(x+y), \qquad para \ todo \ u \in L_2(\mathbb{R}).$$

Aplicando la transformada de Fourier a el operador se tiene que

$$[E_y u]\tilde{}(p) = e^{ipy}\tilde{u}(p).$$

A partir del operador traslación podemos definir el operador diferencial discreto (ver [16]) el cual se define por:

Definición 2.2.2. Sea $D_h : L_2(\mathbb{R}) \to L_2(\mathbb{R})$, el operador diferencial discreto, dado por

$$D_h \equiv \frac{\left(E_{\frac{h}{2}} - E_{-\frac{h}{2}}\right)}{h}.$$

De lo anterior tenemos que

$$D_h = \frac{2i}{h} sen \frac{hp}{2} \quad y \quad \left[D_h^2 u\right] \tilde{(p)} = -\frac{4}{h^2} sen^2 \frac{hp}{2} \tilde{u}(p).$$

Definición 2.2.3. El operador pseudodiferencial $L(x, \hat{p}) : L_2(\mathbb{R}) \to L_2(\mathbb{R}), \hat{p} = -i\frac{d}{dx}$ está definido por su símbolo L(x, p) (ver en [23])de la siguiente forma

$$[L(x,\hat{p})u](x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ipx} L(x,p)\tilde{u}(p)dp, \qquad u(x) \in L_2(\mathbb{R})$$

Observe que el símbolo $-d^2/dx^2$ es p^2 , mientras que D_h^2 es $\frac{4}{h^2}sen^2\frac{hp}{2}$.

Ahora, nos ocuparemos en la interpolación de la ecuación (2.3), de tal manera que dicho integrando se anule fuera de un intervalo finito, de tal forma que sea equivalente hacer el cálculo de la integral sobre tal intervalo exclusivamente y sólo posee dos polos. Por la forma de la ecuación para los polos, a saber (ver en [21]),

$$\frac{4}{h^2}sen^2\frac{hp}{2} + \beta^2 = 0.$$
(2.5)

Como tenemos que $E = -\beta^2$, $\beta \to 0$, $\varepsilon \to 0$, entonces el intervalo que debemos tomar es $[-\pi/h, \pi/h]$. Es decir, nos ocupamos de una interpolación $\Psi_h(x)$ de la sucesión $\psi_j \in l_2$ referida en (2.3) que esté en $L_2(\mathbb{R})$, cuya transformada de Fourier tenga soporte $[-\pi/h, \pi/h]$. Para esto definimos lo siguiente

Definición 2.2.4. El subespacio M_h de $L_2(\mathbb{R})$ de las funciones de bandas limitadas con frecuencia $f = \frac{p}{2\pi}$ tales que $f \leq \frac{1}{2h}$, (ver en [2]) se define como

$$M_h = \left\{ u(x) \in L_2(x) : \sup \tilde{u}(x) \subset \left[-\frac{\pi}{h}, \frac{\pi}{h} \right] \right\}.$$

El espacio M_h es cerrado en $L_2(\mathbb{R})$, entonces M_h es un espacio de Hilbert y es separable. Luego podemos encontrar una sucesión ortogonal completa (ver en [17]).

Consideremos $\varphi_j(x)$ con $j \in \mathbb{Z}$ y una sucesión $v_j \in l_2$, entonces por el teorema Riesz-Fischer (ver en [19]), la serie

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} v_j \varphi_j(x)$$

converge a un elemento de M_h , por lo tanto converge en $L_2(\mathbb{R})$. Esto permite generar una interpolación de la sucesión $v_j \in l_2$, de la ecuación (2.3), si las funciones $\varphi_j(x)$ son tales que $\varphi_j(kh) = \delta_{jk}, j, k \in \mathbb{Z}$ donde δ_{jk} es el símbolo de Kronecker. Por otra parte, ya que $u(p) \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ para toda $u(x) \in M_h$, se sigue (ver en [5]) que $u(x) \in M_h$ es una función continua acotada y que $\lim_{x \to \pm \infty} u(x) = 0$; de hecho $u(x) \in C_0^{\infty}(\mathbb{R})$ por tener $\tilde{u}(p)$ soporte compacto (ver en [5]).

Introducimos la función seno cardinal

$$sen cx = \begin{cases} \frac{senx}{x} & \text{si } x \neq 0\\ 0 & \text{si } x = 0 \end{cases}$$

Si tomamos $b \in \mathbb{R}^+$, la transfomada de Fourier de la función seno cardinal

$$\widetilde{[sen\,cbx]}(p) = \frac{1}{b}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\chi_{[-b,b]}(p).$$

El conjunto de todas las traslaciones de las funciones seno cardinales dadas por

$$\left\{ sen \, c\pi \left(\frac{x}{h} - j \right) \right\}_{j \in \mathbb{Z}},$$

constituyen una base ortogonal para M_h .

Definición 2.2.5. Para una sucesión v_j definimos la interpolación de Whittaker-Kotelnikov $v_h(x)$ por

$$v_h(x) = [Kot_h \{v_j\}](x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} v_j sen \, c\pi(\frac{x}{h} - j).$$

Podemos aplicar la interpolación de Whittaker-Kotelnikov al primer término de la ecuación (2.3) obtenemos

$$\left[Kot_h \frac{1}{h^2} \{ \varphi_{j+1} - 2\varphi_j + \varphi_{j-1} \} \right] (x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{1}{h^2} \{ \varphi_{j+1} - 2\varphi_j + \varphi_{j-1} \} sen \, c\pi (\frac{x}{h} - j)$$
$$= \frac{1}{h^2} (\varphi_h (x+h) - 2\varphi_h (x) + \varphi_h (x-h)).$$

De igual forma debemos aplicar la interpolación de Whittaker-Kotelnikov para V_j , primero definimos

Definición 2.2.6. Definimos el operador $V_h : L_2(\mathbb{R}) \to M_h$ de la siguiente forma

$$[V_h u](x) = [Kot_h \{V_j u_j\}](x), \quad u \in L_2(\mathbb{R}), \quad u_j = u(jh).$$

El operador V_h puede ser representado en forma integral de esta forma

$$[V_{h}u](x) = \int_{\mathbb{R}} K_{h}(x, x')u_{j}(x)dx'$$

con el nucleo,

$$K_h(x, x') = \frac{1}{h} \sum V_j \operatorname{senc}(\frac{x}{h} - j) \operatorname{senc}(\frac{x'}{h} - j)$$

Ahora la interpolación de los términos de la ecuación en todo \mathbb{R} , esta dada por

$$\left(-D_h^2 + \varepsilon V_h\right)\varphi_h = E\varphi_h.$$

Definición 2.2.7. El operador discreto de Schrödinger $H_h : M_h \to M_h$, está dado por

$$H_h \equiv -D_h^2 + \varepsilon \tilde{V}_h.$$

El siguiente lema, nos indica el paso a la transformada de Fourier sobre interpolación de Whittaker-Kotelnikov en la ecuación Schrödinger.

Lema 2.2.8. La función $\tilde{\varphi}_h(p)$ satisface la ecuación

$$\left(\frac{4}{h^2}sen^2\frac{hp}{2} - E\right)\tilde{\varphi}_h(p) = -\frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}}W(p-p')\tilde{\varphi}_h(p')dp'$$

con $p \in \left[-\frac{\pi}{h}, \frac{\pi}{h}\right]$, donde W(p) denota la $\frac{\pi}{h}$ -continuación periodica a todo \mathbb{R} de $\tilde{V}_h(p)$ y esta dada por

$$W(p) = \frac{h}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j} V_j e^{-ijhp}$$
(2.6)

Demostración. La interpolación de la ecuación (2.3) en todo el eje real, esta dada por

$$(-D_h^2 + \varepsilon V_h)\varphi_h = E\varphi_h,$$

esta ecuación la podemos escribir como

$$\begin{aligned} (-D_h^2 - E)\varphi_h &= -\frac{\varepsilon}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{ipx} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} W(p - p') \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip'x'}\varphi_h(x')dx'dp'dp \\ &= -\frac{h\varepsilon}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} \sum_j V_j e^{ipx - ijh(p - p') - ip'x'}dp'dp\varphi_h(x')dx' \\ &= -\frac{\varepsilon}{h} \int_{\mathbb{R}} (\sum_j V_j senc\pi(\frac{x}{h} - j)senc\pi(\frac{x'}{h} - j))\varphi_h(x')dx' \end{aligned}$$

Aplicando la transformada Fourier se obtiene

$$\left(\frac{4}{h^2}sen^2\frac{hp}{2} - E\right)\tilde{\varphi}_h(p) = -\frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}}W(p-p')\tilde{\varphi}_h(p')dp'$$

donde

$$W(p) = \frac{h}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j} V_j e^{-ijhp}.$$

2.2.1. Espectro en el Caso Discreto

Definición 2.2.9. El espectro esencial de un operador son todos los puntos del espectro excepto valores aislados de multiplicidad finita, es decir, si λ esta en el espectro esencial del operador H si y solo si existe un sucesión v_j de vectores linealmente independiente (o mutuamente ortogonales) tales que $||Hv_j - \lambda v_j|| \rightarrow 0$, cuando $j \rightarrow \infty$.

Ahora tenemos por teorema de Weyl que el espectro esencial operador H_h coincide con el operador D_h , es decir que, $\sigma_{ess}(H_h) = \sigma_{ess}(D_h)$. El siguiente lema muestra el espectro esencial del operador H_h .

Lema 2.2.10. El espectro esencial del operador H_h es el intervalo $[0, \frac{4}{h^2}]$.

Demostración. Debido a la observación anterior, demostraremos que el espectro esencial de D_h es el intervalo $[0, \frac{4}{h^2}]$.

Sea $\lambda \in \mathbb{C} \setminus [0, \frac{4}{h^2}])$, veamos que $\lambda \in \rho(D_h^2)$, es decir que, veamos el operador $\lambda I - D_h^2$ tiene inverso y es acotado.

En efecto, consideremos $u \in L(\mathbb{R})$ una función tal que $(\lambda I - D_h^2)(u) = 0$, aplicando la transformada de Fourier obtenemos

$$(\lambda I - D_h^2)\tilde{u} = (\lambda - \frac{4}{h^2}sen^2\frac{hp}{2})\tilde{u} = 0,$$

como $\lambda - \frac{4}{h^2} sen^2 \frac{hp}{2}$ no se anula, esto implica que u = 0. Por lo tanto $\lambda I - D_h^2$ es uno a uno.

Ahora para cada $v \in M_h$ existe un $u \in M_h$ tal que $(\lambda I - D_h^2)(u) = v$, aplicando el teorema de inversión para la transformada de Fourier obtenemos

$$u = (\lambda I - D_h^2)^{-1} v = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{ipx} \frac{e^{ipx} \tilde{v}(p)}{\lambda - \frac{4}{h^2} \operatorname{sen}^2(\frac{hp}{2})} dp.$$

Ve
amos ahora que el operador $(\lambda I - D_h^2)^{-1}$ es acotado

$$\begin{aligned} \left\| (\lambda - D_h^2)^{-1} v \right\|^2 &= \left\| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} \frac{e^{ipx} \tilde{v}(p)}{\lambda - \frac{4}{h^2} sen^2 \frac{hp}{2}} dp \right\|^2 \\ &\leq \frac{1}{m^2} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} |\tilde{v}(p)|^2 dp = \frac{1}{m^2} \|v\|^2, \end{aligned}$$

donde *m* es la mínima distancia entre λ y los puntos del conjunto $[0, \frac{4}{h^2}]$, por tanto $(\lambda I - D_h^2)^{-1}$ es acotado. De esta forma cualquier $\lambda \in \mathbb{C} \setminus [0, \frac{4}{h^2}])$ esta en la resolvente de $\rho(D_h^2)$.

Ahora tomemos un $\lambda \in [0, \frac{4}{h^2}]$ y consideremos la sucesiones de funciones $u_v = v^{\frac{1}{4}} e^{-vx^2 + ip_o x}$ con v > 0, veamos que u_v es una suceción de Weyl para λ . En efecto, si tenemos que

$$\begin{aligned} \|u_v\|^2 &= \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} \left| v^{\frac{1}{4}} e^{-vx^2 + ip_0 x} \right|^2 dx \\ &= v^{\frac{1}{2}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{-2vx^2} \left| e^{ip_0 x} \right|^2 dx \\ &= v^{\frac{1}{2}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{-2vx^2} dx \end{aligned}$$

tomando $\tau^2=2vx^2$ obtenemos que

$$||u_v||^2 = \frac{v^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{2v}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{-\tau} d\tau = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

esto indica que la norma de todas las funciones u_v son constantes, ahora calculamos la transfomada de Fourier de tales funciones

$$\begin{aligned} \tilde{u}_v &= \frac{v^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{-v(x^2 + i(p-p_0)\frac{x}{v})} dx \\ &= \frac{v^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{-v[(x + \frac{i(p-p_0)}{2v})^2 + \frac{i(p-p_0)}{4v^2})]} dx \end{aligned}$$

Calculando el cuadrado de la norma de $(\lambda + D_h^2) u_v$ tenemos que

$$\begin{split} \left\| (\lambda + D_h^2) u_v \right\|^2 &= \left\| (\lambda - \frac{4}{h^2} sen^2 \frac{hp}{2}) \tilde{u}_v \right\|^2 \\ &= \left\| (\frac{4}{h^2} sen^2 \frac{hp_0}{2} - \frac{4}{h^2} sen^2 \frac{hp}{2}) \tilde{u}_v \right\|^2 \\ &= \frac{16}{h^4} \left\| (sen^2 \frac{hp_0}{2} - sen^2 \frac{hp}{2}) \tilde{u}_v \right\|^2 \\ &= \frac{16}{h^4} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} \left| (sen^2 \frac{hp_0}{2} - sen^2 \frac{hp}{2}) \tilde{u}_v(p) \right|^2 \\ &= \frac{8v^{\frac{-1}{2}}}{h^4 r_v} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} (sen^2 \frac{hp_0}{2} - sen^2 \frac{hp}{2})^2 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2v}} dp \end{split}$$

Tomando $p_0 = 2 \operatorname{arcsen}(\frac{\sqrt{\lambda}}{2}) \operatorname{con} \lambda \in [0, \frac{4}{h^2}]$. Acotando las integrales anteriores separadamente en los intervalos $(-\infty, p_0 - 1], [p_0 - 1, p_0 + 1]$ y $[p_0 + 1, -\infty)$. Primero miramos que

$$\int_{p_0+1}^{\frac{\pi}{h}} (sen^2 \frac{hp_0}{2} - sen^2 \frac{hp}{2})^2 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2v}} dp \leq \int_{p_0+1}^{\frac{\pi}{h}} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2v}} dp$$
$$= \int_{1}^{\frac{\pi}{h}+p_0} e^{-\frac{t^2}{2v}} dt$$
$$= 2v e^{-\frac{1}{2v}}$$

donde $t = p - p_0$, luego

$$\int_{p_0+1}^{\frac{\pi}{h}} (sen^2 \frac{hp_0}{2} - sen^2 \frac{hp}{2})^2 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2v}} dp \leq (\frac{8v^{\frac{-1}{2}}}{h^4 r_v}) 2v e^{-\frac{1}{2v}}$$
$$= \frac{16v^{\frac{1}{2}}}{h^4 r_v} e^{-\frac{1}{2v}} \to 0, \text{ cuando } v \to 0.$$

De forma análoga realizamos el proceso para la integral cuando $(-\infty, p_0]$, de igual forma concluimos que la integral es 0 cuando $v \to 0$. Por otro lado teniendo en cuenta el lema de Hadamard (ver en [14] y [15]) el cual nos indica que

$$sen^{2}\frac{hp_{0}}{2} - sen^{2}\frac{hp}{2} = (p - p_{0})\int_{0}^{1} (sen^{2}\frac{h\xi}{2})'_{\xi} \mid_{\xi = p_{0} + s(p - p_{0})} ds$$

tomando $F(p, p_0) = \int_0^1 (sen^2 \frac{h\xi}{2})'_{\xi} |_{\xi=p_0+s(p-p_0)} ds$ donde este integrando es de clase C^{∞} , podemos observar que

$$\begin{split} \int_{p_0-1}^{p_0+1} (sen^2 \frac{hp_0}{2} - sen^2 \frac{hp}{2})^2 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2v}} dp &= \int_{p_0-1}^{p_0+1} (p-p_0)^2 F(p,p_0) e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2v}} dp \\ &\leq M \int_{p_0-1}^{p_0+1} (p-p_0) e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2v}} dp \\ &= 2vM\sqrt{2v} \int_{-\frac{1}{\sqrt{2v}}}^{\frac{1}{\sqrt{2v}}} t^2 e^{-t^2} dt \\ &= 2vM\sqrt{2v} \left[\frac{-1}{2} \left(te^{-t^2} \left| \frac{1}{\sqrt{2v}} - \int_{-\frac{1}{\sqrt{2v}}}^{\frac{1}{\sqrt{2v}}} e^{-t^2} dt \right) \right] \\ &= Mv^{\frac{3}{2}}\sqrt{2} \left(\int_{-\frac{1}{\sqrt{2v}}}^{\frac{1}{\sqrt{2v}}} e^{-t^2} dt - \sqrt{\frac{2}{v}} e^{-\frac{1}{2v}} \right) \end{split}$$

donde M es el máximo de $F(p, p_0)$ en $\left[-\frac{\pi}{h}, \frac{\pi}{h}\right]$ y $t = \frac{p-p_0}{\sqrt{2v}}$, luego como

$$Mv^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}\left(\int_{-\frac{1}{\sqrt{2v}}}^{\frac{1}{\sqrt{2v}}}e^{-t^{2}}dt - \sqrt{\frac{2}{v}}e^{-\frac{1}{2v}}\right) \to 0 \text{ cuando } v \to 0.$$

Entonces

$$\frac{8v^{\frac{-1}{2}}}{h^4 r_v} \int_{p_0-1}^{p_0+1} (sen^2 \frac{hp_0}{2} - sen^2 \frac{hp}{2})^2 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2v}} dp \to 0 \quad \text{cuando} \quad v \to 0.$$

por tanto como $||u_v||$ es constante no nula y que si $\lambda \in [0, \frac{4}{h^2}]$, entonces $||(\lambda + D_h^2)u_v|| \rightarrow 0$, cuando $v \rightarrow 0$, es decir que u_v son funciones propias aproximadas para λ , en conclución el espectro essencial del D_h^2 es $[0, \frac{4}{h^2}]$.

La siguiente definición es similar a la definición (1.4.1) pero en el caso discreto.

Definición 2.2.11. Una solución φ_h de la ecuación (2.3) es llamada resonancia si φ_h satisface

$$\varphi_h \propto e^{\beta_h |jh|}$$
 $|j| \to \infty$ (2.7)

Teorema 2.2.12. Sea $\sum V_j > 0$. Entonces para ϵ suficientemente pequeño, la ecuación (2.3) tiene un resonancia para $E = -\beta_h^2$, donde

$$\beta_h = \frac{h\varepsilon}{2} \sum V_j + O(\varepsilon^2). \tag{2.8}$$

Demostración. Consideremos la ecuación (2.3) con $E = -\beta_h^2$ y $V_j = 0$. Aplicando la interpolación Whittaker-Kotelnikov obtenemos que

$$\frac{1}{h^2}(\varphi_h(x+h) - 2\varphi_h(x) + \varphi_h(x-h)) = -\beta_h^2 \varphi_h(x).$$
(2.9)

La transformada de Fourier de la ecuación (2.9), obtenemos

$$\tilde{\varphi}_h(p) = 2\pi C_1 \delta(p - p_+) + 2\pi \delta(p - p_-), \qquad (2.10)$$

 ${\rm donde}$

$$p_{\pm} = \frac{2\pi k}{h} \pm \frac{2i\sinh^{-1}(\frac{\beta h}{2})}{h},$$
 (2.11)

son ceros de la ecuación (2.5), entonces

$$\varphi_h(x) = C_1 e^{ip_+ x} + C_2 e^{ip_- x}.$$

Ahora, por el lema (2.2.8) tenemos que $\tilde{\varphi}_h$ se cumple que

$$A_{h}(p) = -\frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} W(p - p') \tilde{\varphi}_{h}(p') dp, \qquad (2.12)$$

donde, $W(p) = \frac{h}{2\pi} \sum_{j} V_{j} e^{-ijhp}$. La expression anterior tiene la forma

$$\left(\frac{4}{h^2}\operatorname{sen}^2\frac{hp}{2} + \beta^2\right)\tilde{\varphi}_h(p) = A_h(p).$$
(2.13)

Nosotros estamos buscando resonancia de la siguiente forma

$$\varphi_h(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{ipx} \frac{A_h(p)}{\frac{4}{h^2} \operatorname{sen}^2(\frac{hp}{2}) + \beta^2} dp + C_1 e^{ip_+x} + C_2 e^{ip_-x}.$$
 (2.14)

Tomaremos los contornos de integración en el plano complejo

$$\Gamma_{+} = \left[-\frac{\pi}{h}, -1 \right] \cup \left\{ p + qi : p^{2} + q^{2} = 1, q > 0 \right\} \cup \left[1, \frac{\pi}{h} \right],$$

$$\Gamma_{-} = \left[-\frac{\pi}{h}, -1 \right] \cup \left\{ p + qi : p^{2} + q^{2} = 1, q < 0 \right\} \cup \left[1, \frac{\pi}{h} \right].$$

Aplicando el teorema Cauchy a la ecuación (2.14), obtenemos

$$\varphi_h(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma_+} e^{ipx} \frac{A_h(p)}{\frac{4}{h^2} \operatorname{sen}^2(\frac{hp}{2}) + \beta^2} dp + \left(C_1 + \frac{\pi A_h(p_+)}{\beta \sqrt{1 + \frac{h^2 \beta^2}{4}}} \right) e^{ip_+ x} + C_2 e^{ip_- x} \quad (2.15)$$

para x > 0.

Consideremos el lado de derecho de la ecuación (2.15) $C_1 = -\frac{\pi A_h(p_+)}{\beta \sqrt{1 + \frac{h^2 \beta^2}{4}}}$, se tiene que

$$\varphi_h(x) = \frac{e^{-x}}{2\pi} \int e^{ipx} \frac{A_h(p+i)}{\frac{4}{h^2} \operatorname{sen}^2(\frac{h(p+i)}{2}) + \beta^2} dp + C_2 e^{ip_-x}$$

Puesto esta última integral es acotada, entonces $\varphi_h(x) = C_2 e^{ip_-x} + O(e^{-x})$ cuando $x \to +\infty$. Similarmente $\varphi_h(x) = C_1 e^{ip_+x} + O(e^x)$, cuando $C_2 = -\frac{\pi A_h(p_-)}{\beta \sqrt{1 + \frac{h^2 \beta^2}{4}}}$ y $x \to -\infty$. Por tanto,

$$\varphi_h(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{ipx} \frac{A_h(p)}{\frac{4}{h^2} \operatorname{sen}^2(\frac{hp}{2}) + \beta^2} dp + C_1 e^{ip_+x} + C_2 e^{ip_-x}.$$

Aplicando la transformada Fourier a la ecuación (2.14) se obtiene que

$$\tilde{\varphi}_h(p) = \frac{A_h(p)}{\frac{4}{h^2} \operatorname{sen}^2(\frac{hp}{2}) + \beta^2} + 2\pi C_1 \delta(p - p_+) + 2\pi \delta(p - p_-).$$
(2.16)

Remplazando (2.16) en (2.12), obtenemos

$$A_{h}(p) = -\frac{\varepsilon}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} \frac{W(p-p')A_{h}(p')}{\frac{4}{h^{2}}\operatorname{sen}^{2}(\frac{hp}{2}) + \beta^{2}} dp' - \varepsilon C_{1}W(p-p_{+}) - \varepsilon C_{2}W(p-p_{-}).$$
(2.17)

Aplicando el teorema del residuo Cauchy a la ecuación (2.17), obtenemos

$$A_{h}(p) = -\frac{\varepsilon}{2\pi} \int_{\Gamma_{+}} \frac{W(p-p')A_{h}(p')}{\frac{4}{h^{2}}\operatorname{sen}^{2}(\frac{hp}{2}) + \beta^{2}} dp' - \varepsilon C_{2}W(p-p_{-}).$$
(2.18)

definimos el operador $T_{\beta,h}: H \to H$ como

$$[T_{\beta,h}A_h(\zeta)](z) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma_+} \frac{W(z-\zeta)A_h(\zeta)}{\frac{4}{h^2} \operatorname{sen}^2(\frac{hp}{2}) + \beta^2} d\zeta, \qquad z \in B_{\frac{\pi}{h}},$$
(2.19)

donde, H es el espacio de funciones analíticas acotadas en $B_{\frac{\pi}{h}} = \{z \in C : |Imz| < \frac{\pi}{h}\},$ con la norma $\|\varphi\| = \sup_{z \in B_{\frac{\pi}{h}}} |\varphi(z)|.$

La ecuación (2.17) la podemos reescribir

$$[I + \varepsilon T_{\beta,h} A_h(\zeta)](z) = -\varepsilon C_2 W(z - p_-), \qquad (2.20)$$

donde, I es el operador identidad. Como $T_{\beta,h}$ es analítica y acotado, entonces es un operador contracción, por lo tanto posee inversa, tomando la inversa de (2.20) se tiene que

$$A_h(z) = -\varepsilon C_2 \left[I + \varepsilon T_{\beta,h} \right]^{-1} W(z - p_-),$$

usando la series Neumann con $z = p_-$, y $C_2 = -\frac{\pi A_h(p_-)}{\beta \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 \beta^2}{4}}}$, obtenemos

$$\beta_h = \frac{\varepsilon \pi}{\sqrt{1 + \frac{h^2 \beta_h^2}{4}}} W(z - p_-) \mid_{z=p_-} + O(\varepsilon^2), \qquad (2.21)$$

con esto concluimos la demostración del teorema.

Capítulo 3

Comparacion entre el Caso Continuo y Discreto

En este capítulo se realizará una comparación entre la resonancia asociada a la ecuación Schrödinger para un potencial regular en el caso continuo y discreto, cuando consideremos $h \rightarrow 0$ y ε fijo suficientemente pequeño. Primero compararemos el valor propio dado en el caso continuo y el discreto, de igual forma función A y por último compararemos la función de onda que modela la resonancia establecida para el caso continuo y discreto. Para esto necesitamos las siguientes afirmaciones

1. A la ecuación (2.6), le aplicamos la fórmula de sumación de Poisson (ver en [2]) obtenemos la siguiente forma

$$W(\zeta) = \sum_{j} \tilde{V}(\zeta + 2\pi j/h).$$
(3.1)

De aquí, tenemos que $W(\zeta) = \tilde{V}(\zeta) + O(h^{\infty})$ para $|\zeta| \leq \frac{\pi}{h}$.

2. La solución de la ecuación (2.5) tiene forma

$$z_{\beta,h} = i\beta(1 + O(h^2)) \tag{3.2}$$

3. El operador $T_{\beta,h}$ definido en (2.19) es acotado uniformente con respecto a h, es decir que,

$$\|T_{\beta,h}\varphi\| \le C \|\varphi\|,$$

con C independiente de h. En efecto

$$\begin{aligned} \|[T_{\beta,h}\varphi(\zeta)](z)\| &= \left\| \frac{1}{2\pi} \int_{T_+} \frac{W(z-\zeta)\varphi(\zeta)d\zeta}{\frac{4}{h^2}sen^2\frac{h\zeta}{2}+\beta^2} \right\| \\ &\leq \ const \|\varphi\| \int_{T_+} |W(z-\zeta)| \, |d\zeta| \end{aligned}$$

remplazando en la ecuación (3.1) se tiene

$$\begin{aligned} \|[T_{\beta,h}\varphi(\zeta)](z)\| &\leq \ const \|\varphi\| \left\{ \int_{T_+} \left(\left| \tilde{V}(z-\zeta) \right| + \left| \tilde{V}(z-\zeta+2\pi/h) \right| + \right. \\ \left| \tilde{V}(z-\zeta-2\pi/h) \right| \left| d\zeta \right| + \\ \left. \int_{T_+} \sum_{j\geq 2} \left| \tilde{V}(z-\zeta+2\pi j/h) \right| \left| d\zeta \right| \right\} \end{aligned}$$

Ahora como tenemos que $|z-\zeta| \leq 2\pi/h$ y

$$\left| \tilde{V}(z+\zeta+2\pi j/h) \right| \le \frac{C_N}{(1+\frac{2\pi(j-1)}{h})} \le \frac{C_N h^n}{2\pi(j-1)}$$

por tanto las dos integrales anteriores son acotadas uniformente por h.

Utilizando las ecuaciones (3.1), (3.2) y remplazando en la (2.2) obtenemos

$$\beta_h = \varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[(1 + \varepsilon T_{\beta,h})^{-1} \tilde{V}(\zeta - i |z_{\beta,h}|) + O(h^2) \right].$$

Haciendo la diferencia entre β y β_h tenemos que

$$\beta - \beta_{h} = \frac{\varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left\{ \left[(1 + \varepsilon T_{\beta})^{-1} \tilde{V}(\zeta - \beta)(i\beta) + O(h^{2}) \right] - \left[(1 + \varepsilon T_{\beta,h})^{-1} \tilde{V}(\zeta - i | z_{\beta,h}|)(i | z_{\beta,h}|) \right] + O(h^{2}) \right\}$$

$$= \frac{\varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left\{ -(\varepsilon T_{\beta}) \left[(1 + \varepsilon T_{\beta})^{-1} \tilde{V}(\zeta - i\beta)(i\beta) \right] - \left[-(\varepsilon T_{\beta,h})(1 + \varepsilon T_{\beta,h})^{-1} \tilde{V}(\zeta - i\beta)(i | z_{\beta,h}|) \right] + O(h^{2}) \right\}$$

$$(3.3)$$

por la ecuación (3.2) tenemos que

$$\tilde{V}(\zeta - i | z_{\beta,h} |) = \tilde{V}(\zeta - i\beta) + O(\beta - \beta_h) + O(h^2),$$

remplazando en la ecuación (3.3) se obtiene que

$$\beta - \beta_h = \varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{2}} \{ -(\varepsilon T_\beta) [(1 + \varepsilon T_\beta)^{-1} \tilde{V}(\zeta - i\beta)(i\beta)] \\ -[-(\varepsilon T_{\beta,h})(1 + \varepsilon T_{\beta,h})^{-1} \tilde{V}(\zeta - i\beta)(i|z_{\beta,h}|)] + \varepsilon O(\beta - \beta_h) + O(h^2) \}.$$

Ahora bien

$$[\{(1+\varepsilon T_{\beta})^{-1} - (1+\varepsilon T_{\beta,h})^{-1}\}\tilde{V}(\zeta - i\beta)](z)$$

=[\{(1+\varepsilon T_{\beta})^{-1}\varepsilon(T_{\beta} - T_{\beta,h})\}U_{\beta}(\zeta)](z)
=\varepsilon(O(\beta - \beta_h) + O(h^2))

donde

$$U_{\beta}(\zeta) = [(1 + \varepsilon T_{\beta})^{-1} \tilde{V}(\zeta - i\beta)](z)$$

debido a que $[(T_{\beta} - T_{\beta,h})\varphi(\zeta)](z) = O(\beta - \beta_h)$ y $[(T_{\beta} - T_{\beta,h})\varphi(\zeta)](z) = O(h^2)$, para $\varphi(p+i0) \in \mathbb{S}(\mathbb{R})$ y $U_{\beta}(p+0i)$ tambien pertenece a $\mathbb{S}(\mathbb{R})$

$$[(1 + \varepsilon T_{\beta,h})^{-1} \tilde{V}(\zeta - i\beta)](z) = U_{\beta}(z) + \varepsilon (O(\beta - \beta_h) + O(h^2)),$$

por la tanto se tiene que

$$\beta - \beta_h = \varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{2}} \{ \varepsilon [T_\beta U_\beta(\zeta) - T_{\beta,h} U_\beta(\zeta)] (i | z_{\beta,h} |) + \varepsilon O(\beta - \beta_h) + O(h^2) \}$$

De aquí, se tiene

$$\begin{split} \beta - \beta_h &= \frac{\varepsilon^2}{2} \int_{\Gamma} \left(\frac{\tilde{V}(i\beta - \zeta)}{\zeta^2 + \beta^2} - \frac{\tilde{V}(i\beta_h - \zeta)}{\zeta^2 + \beta_h^2} \right) U_{\beta}(\zeta) d\zeta + \varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{2}} (\varepsilon O(\beta - \beta_h) + O(h^2)) \\ &= \varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{2}} (\varepsilon O(\beta - \beta_h) + O(h^2)). \end{split}$$

Finalmente, podemos decir que $\beta - \beta_h = \varepsilon O(h^2)$ para ε suficientemente pequeño. De forma análoga podemos decir que

$$A(p) - A_h(p) = \frac{\varepsilon}{\beta} O(h^2)$$
 con $|p| \le \pi/h.$

Podemos decir que la resonancia se comporta de manera similar para el caso continuo y discreto. En conclusión la función de onda que modela la resonancia para el caso continuo y discreto se aproxima tanto como se quiere, siempre y cuando h tienda a cero.

Bibliografía

- S. C. Chapra, R. P. Canale, Numerical Methods for Engineers with Personal Computer Applications, *McGraw-Hill, Inc., U. S. A.* (1985).
- [2] C. Gasquet, P. Witomski, Fourier Analysis and Applications. Filtering, Numerical Computation, Wavelets. Translated by R. Ryan, Springer-Verlag New York, Inc. (1999).
- [3] P. D Hislop and I. M Sigal, Introduction to Scattering Theory, With Applications to Schrodinger Operators. Springer, (1995).
- [4] J. Howland. S. Scattering Theory for Hamiltonians Periodic in Time, Indiana Univ. Math, (28), (1979), 471-494.
- [5] A. N. Kolmogorov, S. V. Fomin, Elementos de la Teoría de Funciones y del Análisis Funcional. *Editorial Mir Moscú*, (1978).
- [6] L. D. Landau, E.M. Lifschitz, Quantum Mechanics, *Pergamon, London*, (1958).
- [7] P. Lax and R. Phillips, Scattering Theory, Academic Press, (1969).
- [8] B. A. Loe, Pole-free Strip for Potential Scattering, J. Differential Equation, (99), (1992)
- [9] A.M. Marin, R.D. Ortiz y J.A. Rodriguez, Resonances for the discrete shallow water equation, *Far East Journal Of Applied Mathematics*, (68) (2012), 117 - 129.

- [10] A.M. Marin, R.D. Ortiz, y J.A. Rodriguez, Asymptotics of eigenfunctions for the Schrödinger equation, Far East Journal Of Applied Mathematics, (66) (2012), 69
 - 76.
- [11] A.M. Marin, R.D. Ortiz, y J.A. Rodriguez, Asymptotics of eigenfunctions for discrete Klein-Gordon equation, International Journal Of Mathematical Sciences And Engineering Applications, (7), (2013), 183 -192.
- [12] A.M. Marin, R.D. Ortiz, and J.A. Rodriguez, Schrödinger equation via (WKB), Bulletin Of Mathematical Sciences & Applications, (2) (2013), 8 - 12.
- [13] A. N. Michel, Ch. J. Herget, Applied Algebra and Functional Analysis, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J, (1981).
- [14] L. Perko, Differential Equations and Dynamical Systems, Springer-Verlag, New York, (1991).
- [15] I. Petrovsk, Ordinary Differential Equations, *Dover Publications, Inc.* New York, (1973).
- [16] J. Rodriguez, P. Zhevandrov, Pozos potenciales pocos profundos para la ecuación discreta de Schrödinger, *Morfismo*, (12), (2008),1-43.
- [17] M. Reed, B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics. Vol 4, Analysis of Operators, Academic Press, New York, 1979.
- [18] M. Reed, B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics, Vol. I: Functional Analysis, Academic Press, Inc. New York, (1980).
- [19] R. D. Richtmyer, Principles of Advanced Mathematical Physics, Vol. I, Springer-Verlag, New York, (1978).
- [20] M.I Romero Rodriguez and P. Zhevandrov, Trapped modes and resonances for water waves over a slightly perturbed bottom, Russian J. Math. Phys, (179), (2010), 307 - 327.

- [21] A. Samarski and V. Andréiev, Métodos en Diferencias para las Ecuaciones Elípticas, *Editorial Mir*, Moscú, (1979).
- [22] M. Schechter, Spectra of Partial Differential Operators, Second Edition, North-Holland Series in Applied Mathematics and Mechanics, Oxford Elsevier Science Publishers B. V. (1986).
- [23] B. Simon, The bound state of weakly Schrödinger operators in one and two dimensions, Ann Phys, (97), (1976), 279-288.
- [24] M. Taylor, Partial Differential Equations, Vol. I Basic Theory, Springer, (1996).
- [25] Yu. V. Egorov, B. W. Schulze, Pseudo-Differential Operators, Singularities, Applications, *Birkhauser Verlag Basel*, Boston Berlin, (1997).
- [26] P. Zhevandrov, A. Merzon, Asymptotics of eigenfunctions in shallow potential wells and related problems, AMS Translations, series 2, 208, (2003), 235-284.
- [27] P. Zhevandrov, A. Merzon, Shallow potential wells for the Schrödinger equation and water waves Progress in Analysis, Proceedings of the 3rd International ISAAC Congress, ed. by H. G. W. Begehr et al., World Scientific, Singapore, (1),(2003), 589-598.